

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА СО СЛУЧАЙНЫМИ МАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. В. Прудников, В. Н. Бородихин*

*Омский государственный университет
644077, Омск, Россия*

Поступила в редакцию 11 января 2005 г.

Осуществлено численное исследование фазовых превращений в трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга во внешнем магнитном поле. Выявлено, что если концентрация спинов в системе меньше пороговой, то случайные магнитные поля разрушают фазовый переход второго рода и происходит фазовый переход первого рода в новое фазовое состояние системы, характеризующееся спин-стекольным основным состоянием и наличием метастабильных энергетических состояний при конечных температурах.

PACS: 64.60.Ak, 75.50.Ee, 75.50.Lk

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование критического поведения неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Это связано с тем, что большинство реальных твердых тел содержит замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на их термодинамические характеристики и, в частности, может существенно сказываться на поведении систем при фазовых переходах. Известно, что влияние замороженных примесей проявляется в виде случайных возмущений локальной температуры для ферро- и антиферромагнитных систем в отсутствие внешнего магнитного поля или в виде случайных магнитных полей для антиферромагнитных систем в однородном магнитном поле.

Исследования показали [1], что в первом случае присутствие замороженных примесей изменяет при фазовых переходах свойства лишь тех магнетиков, теплоемкость которых в однородном состоянии испытывает расходимость в критической точке. В противном случае присутствие примесей не сказывает-

ся на поведении магнетиков при критической температуре. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен гамильтониану в модели Изинга. Исследованию критических свойств неупорядоченной модели Изинга в последнее время было посвящено значительное число работ [2]. Для разбавленных изингоподобных систем было получено хорошее согласие теоретических расчетов с результатами эксперимента и компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

Несмотря на интенсивные теоретические и экспериментальные исследования магнетиков со случайными полями в течение последних двадцати лет [3], в настоящее время существует совсем немного надежно установленных фактов о поведении данных систем. В частности, природа фазового перехода в модели Изинга со случайными полями все еще остается невыясненной, а получаемые теоретические результаты находятся в противоречии с экспериментальными. Практически единственным надежно установленным теоретическим фактом является то, что верхняя критическая размерность для этого фазового перехода (размерность системы, выше которой критические явления описываются теорией

*E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

среднего поля) равна шести [3] в отличие от одно-родных систем, где она равна четырем. В последнее время в вопросе о нижней критической размерности d_l перехода в модели Изинга со случайными полями (размерность системы, выше которой осуществляется дальнейшее упорядочение при отличных от нуля температурах) при существующих аргументах как в пользу $d_l = 2$ [4], так и в пользу $d_l = 3$ [5] после появления работ [6, 7] исследователи пришли к заключению, что $d_l = 2$. Однако природа фазового перехода в трехмерной модели Изинга до сих пор еще не ясна. По одним данным, это фазовый переход первого рода [8, 9] вплоть до очень низких значений случайного поля, по другим — переход второго рода [10, 11].

Для описания влияния случайных полей на поведение магнитных систем используются две на качественном уровне эквивалентные модели: ферромагнитная модель Изинга со случайным магнитным полем (RFIM) [12, 13] и неупорядоченная антиферромагнитная модель Изинга во внешнем однородном поле (DAFF) [14]. Реальные магнитные системы со случайными полями являются антиферромагнетиками с замороженными примесями немагнитных атомов, в поведении которых наряду с антиферромагнитным взаимодействием ближайших атомов проявляются эффекты влияния ферромагнитного взаимодействия атомов, следующих за ближайшими. Структуру антиферромагнетика можно представить в виде нескольких ферромагнитных подрешеток, вставленных друг в друга таким образом, что суммарная намагниченность антиферромагнетика остается равной нулю, несмотря на то что при температуре ниже температуры Нееля в рамках каждой ферромагнитной подрешетки происходит магнитное упорядочение. Примерами двухподрешеточных антиферромагнетиков являются следующие материалы: NiO, MnO, Fe₂O₃, MnF₂ и др. В качестве примеров реализации неупорядоченных систем со случайными магнитными полями можно привести кристаллические одноосные изингоподобные антиферромагнетики MnF₂, FeF₂ с примесями атомов цинка во внешнем магнитном поле [15].

2. МОДЕЛЬ

В данной работе методом Монте-Карло осуществлено компьютерное моделирование термодинамического поведения неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга во внешнем магнитном поле на простой кубической решетке с учетом взаимодей-

ствия спинов, следующих за ближайшими соседями. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = J_1 \sum_{ij} p_i p_j \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{ik} p_i p_k \sigma_i \sigma_k + \mu h \sum_i p_i \sigma_i, \quad (1)$$

где $\sigma_i = \pm 1$ — спин узла i , μ — магнетон Бора, величины $J_1 = 1$ и $J_2 = -1/2$ характеризуют соответственно обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее антиферромагнитный характер, и ферромагнитное взаимодействие спинов, следующих за ближайшими соседями, h — напряженность однородного магнитного поля, p_i, p_j — случайные переменные, описываемые функцией распределения

$$P(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p)\delta(p_i) \quad (2)$$

и характеризующие распределенные по узлам решетки замороженные немагнитные атомы примеси (пустые узлы) с концентрацией $c_{imp} = 1 - p$, где p — спиновая концентрация системы. При $p = 1.0$ данная модель с конкурирующими взаимодействиями уже более двадцати лет исследуется методами Монте-Карло [16, 17], однако для описания влияния эффектов неупорядоченности на критическое поведение систем она была применена нами в работе [18] впервые. В упоминаемой выше модели DAFF [13] не учитывалась конкуренция ферромагнитного взаимодействия. С физической точки зрения, данная модель является наиболее реалистичной. Величина эффектов случайных полей в модели, как и в реальных магнитных системах, определяется концентрацией примесей и величиной внешнего поля. Поэтому параметры модели могут быть сопоставлены с параметрами реального физического эксперимента в неупорядоченных изингоподобных антиферромагнетиках. В случае же наиболее популярной для численного исследования ферромагнитной модели Изинга со случайным магнитным полем (RFIM) данная процедура сопоставления величины случайного поля с концентрацией примесей в образце и величиной внешнего поля затруднена. Это, в свою очередь, делает невозможным сопоставление масштабов изменения случайных полей в модели RFIM с величиной структурного беспорядка в реальных системах, которая, как показывается в данной работе, оказывает решающее влияние на фазовые превращения в системе.

Для характеристики антиферромагнетика вводят понятие «шахматной» намагниченности M_{stg} — разности намагниченностей двух подрешеток, явля-

ющейся параметром порядка. Для анализа характера фазового перехода в работе вычислялись кумулянты Биндера [19]

$$U = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle M_{stg}^4 \rangle]}{[\langle M_{stg}^2 \rangle]^2} \right). \quad (3)$$

В данном выражении угловые скобки означают статистическое усреднение, а квадратные скобки — усреднение по различным примесным конфигурациям. Следует отметить, что применение кумулянтов позволяет хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. Так, в случае фазовых переходов второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов имеют ярко выраженную точку пересечения, в то время как при фазовых переходах первого рода кривые кумулянтов характеризуются специфическим видом без взаимного пересечения.

В работе также проводилось исследование спин-стекольных состояний. Известно [20], что в спиновых стеклах при температуре ниже T_c происходит фазовый переход в состояние, характеризующееся наличием в термодинамическом пределе бесконечного числа метастабильных энергетических состояний, разделенных потенциальными барьерами. Сложный характер спинового упорядочения в таких системах может быть описан спин-стекольным параметром порядка

$$q_s = \frac{1}{pL^3} \left[\langle \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \rangle \right], \quad (4)$$

где индексы « α » и « β » характеризуют спиновые конфигурации для различных реплик неупорядоченной системы, моделируемых одновременно при одной и той же температуре и различающихся начальными конфигурациями.

Для получения достоверных значений равновесных термодинамических характеристик поведения систем в критической области необходимо, чтобы процедуры статистического усреднения и усреднения по различным примесным конфигурациям осуществлялись только после достижения системой равновесного состояния. Критическое поведение различных систем, в особенности неупорядоченных, характеризуется аномально большими временами релаксации, которые значительно возрастают по мере увеличения размера моделируемых систем. Для достижения равновесных состояний в области температур, близких к критическим, и для определения в них термодинамических характеристик в работе осуществлялась процедура медленного квазистати-

ческого замораживания системы из неупорядоченной фазы, начиная с температуры, при которой ни в одной из «прогонок» не было выявлено метастабильных состояний. Процедура квазистатического замораживания состояла из повторяемого при каждой температуре режима релаксации в 5000 шагов, последующего режима усреднения в 10000 шагов и понижения температуры с шагом $\Delta T = 0.1$ с использованием в качестве начальной спиновой конфигурации, созданной на последнем шаге предшествующей температуры. Данная процедура проводилась с целью получения устойчивого равновесного состояния для каждой температуры и устранения возможности попадания в метастабильные состояния [18].

В процессе расчета термодинамических характеристик для каждой решетки размером L при фиксированных значениях h и p осуществлялось статистическое усреднение по пяти «прогонкам» с различными начальными спиновыми конфигурациями для каждой примесной конфигурации и последующее усреднение по десяти–двадцати различным конфигурациям примесей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Были проведены исследования температурных зависимостей различных термодинамических характеристик трехмерной антиферромагнитной модели Изинга в широкой области концентраций примеси с учетом изменения внешнего магнитного поля от $h = 1$ до $h = 4$ для систем с размерами от $L = 8$ до $L = 64$.

Исследования показали, что для каждого фиксированного значения магнитного поля h всю область спиновых концентраций p можно разбить на несколько. В области $p_u < p < 1$, где p_u — величина порога примесной перколяции (для данной модели $p_u = 0.83$), при концентрациях спинов, ниже которой примеси образуют протекающий кластер, реализуется фазовый переход второго рода при $T_c(h, p)$ из парамагнитного в антиферромагнитное состояние [18]. В области $p_c < p < p_u$, где p_c — величина порога спиновой перколяции (для данной модели $p_c = 0.17$), для каждого размера решетки L' можно выделить такую концентрацию $p(L', h)$, что для решеток с $L < L'$ при $p > p(L', h)$ все вычисляемые характеристики демонстрируют температурное поведение, характерное для фазовых переходов второго рода, а при $p < p(L', h)$ — поведение, характерное для фазовых переходов первого рода. С ростом поля h и размера решетки L' спиновая концентра-

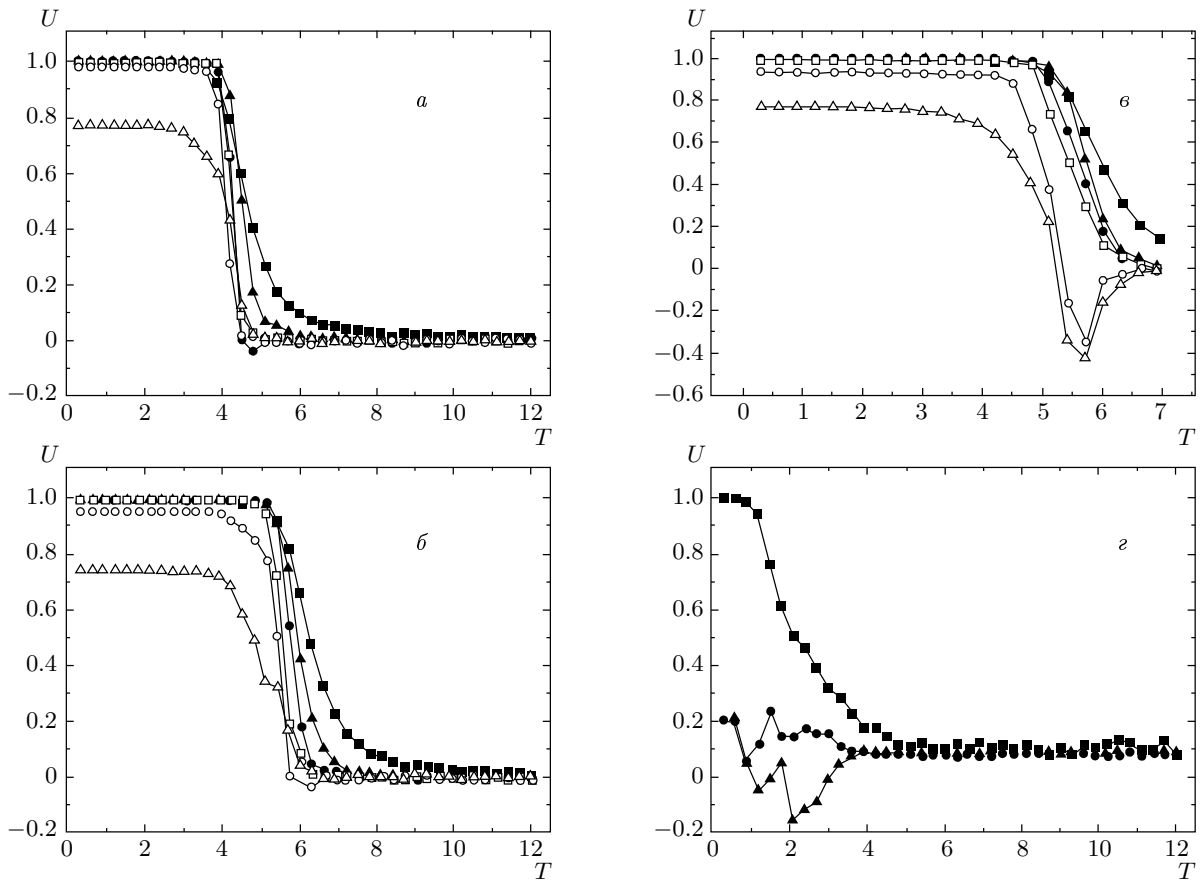


Рис. 1. Температурные зависимости кумулянтов Биндера при $p = 0.5$ и $h = 1$ (а), $p = 0.725$ и $h = 3$ (б), $p = 0.8$ и $h = 4$ (в), $p = 0.5$ и $h = 3$ (г) для решеток с размерами $L = 8$ (■), 16 (▲), 24 (●), 32 (□), 48 (○), 64 (△)

ция $p(L', h)$ растет, приближаясь к пороговому значению $p_u = 0.83$.

Эти размерные особенности обусловлены тем, что в данной области спиновых концентраций в образцах возникают взаимно проникающие протекающие спиновый и примесный кластеры, фрактальные размерности которых зависят от спиновой концентрации и меняются от трех до нуля. В результате размерные критерии разрушения дальнего упорядочения для изингоподобных систем и образования доменных структур с характерными размерами L_c , выдвинутые в работе [21],

$$\frac{h_r}{J(L)} = \frac{h_r}{JL^{(2-d_f)/2}}, \quad L_c \approx \left(\frac{J}{h_r}\right)^{2/(2-d_f)}, \quad (5)$$

где h_r — амплитуда случайных полей, J — величина обменного взаимодействия, можно отнести к фрактальной размерности d_f протекающего спинового кластера и прогнозировать разрушение дальнего антиферромагнитного упорядочения при $d_f < 2$.

Рисунки 1–4 наглядно подтверждают выводы о границах разбиения всей области спиновых концентраций данной антиферромагнитной модели с различной степенью влияния эффектов случайных магнитных полей от $h = 1$ до $h = 4$ для размеров моделируемых систем $L \leq 64$.

На рис. 1 представлены температурные зависимости кумулянтов Биндера U для решеток различных размеров при $h = 1$ ($p = 0.5$), $h = 3$ ($p = 0.5, 0.725$) и $h = 4$ ($p = 0.8$). Видно, что в случае спиновых концентраций, близких к значению порога примесной перколяции p_u , кумулянты Биндера перестают пересекаться лишь для решеток с достаточно большими размерами $L \geq 64$, в то время как при $p = 0.5$ ($h = 3$) пересечение кумулянтов отсутствует при всех рассмотренных размерах L . Сопоставление рис. 1а–в показывает, что с ростом поля h (усилением эффектов случайных полей) от $h = 1$ до $h = 4$ подобные размерные изменения в поведении кумулянтов Биндера наблюдаются при увеличении спи-

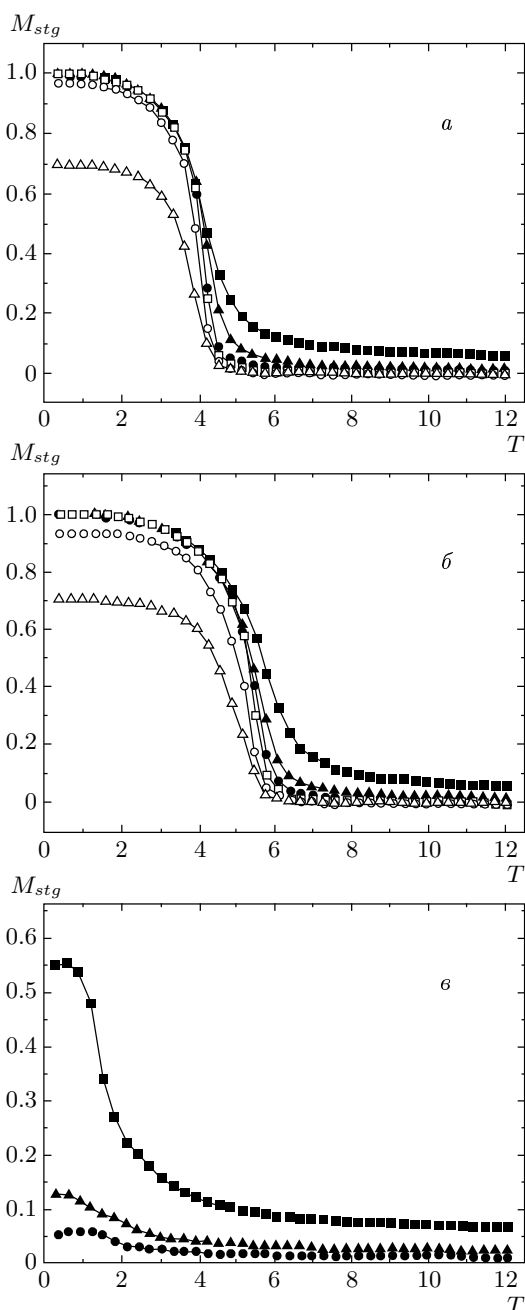


Рис. 2. Температурные зависимости «шахматного» параметра порядка при $p = 0.5$ и $h = 1$ (а), $p = 0.725$ и $h = 3$ (б), $p = 0.5$ и $h = 3$ (в) для решеток с размерами $L = 8$ (■), 16 (▲), 24 (●), 32 (□), 48 (○), 64 (△)

новой концентрации в образцах от $p = 0.5$ до $p = 0.8$.

Для систем со спиновыми концентрациями $p < p(L, h)$ было выявлено возникновение особенностей в поведении шахматной намагниченности $M_{stg}(T)$ (рис. 2) при всех перечисленных значениях

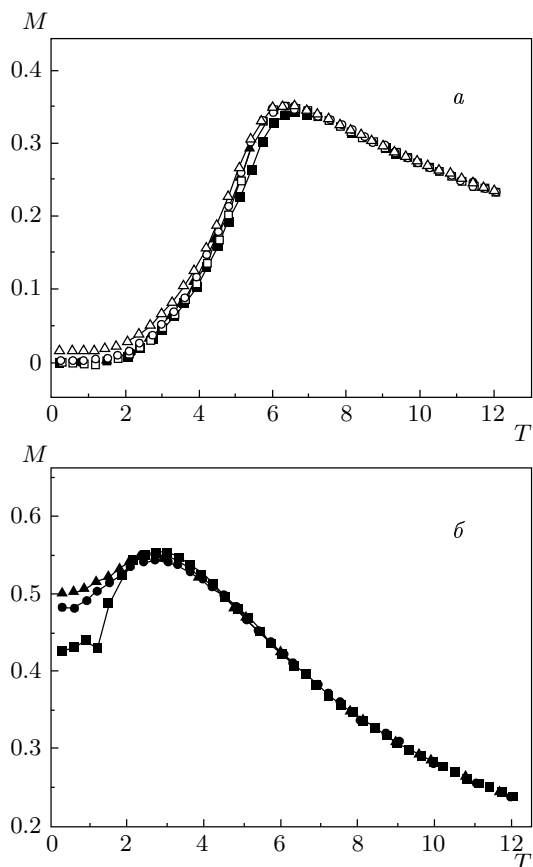


Рис. 3. Температурные зависимости полной намагниченности при $p = 0.725$ и $h = 3$ (а), $p = 0.5$ и $h = 3$ (б) для решеток с размерами $L = 8$ (■), 16 (▲), 24 (●), 32 (□), 48 (○), 64 (△)

магнитного поля h : величина M_{stg} в области насыщения сильно зависит от размеров моделируемой системы. При этом можно отметить тенденцию уменьшения шахматной намагниченности в области насыщения с ростом L , что указывает на отсутствие антиферромагнитного основного состояния системы. Выявленное малое увеличение полной намагниченности M системы с ростом L (рис. 3а) свидетельствует о том, что система разбивается на совокупность антиферромагнитных доменов с размерами $L < L'$, разделяемых стенками с приблизительной компенсацией их намагниченностей. Однако с усилением влияния случайных магнитных полей за счет роста концентрации немагнитных атомов и величины магнитного поля в системе наблюдается сокращение числа и размеров антиферромагнитных доменов (рис. 2в) и увеличение числа и размеров ферромагнитных доменов (рис. 3б) при $M_{stg} + M < 1$.

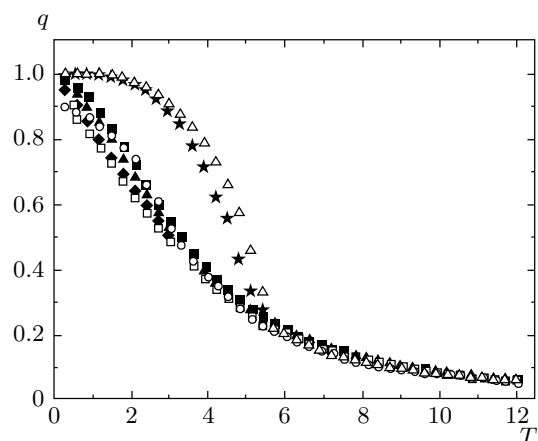


Рис. 4. Температурная зависимость спин-стекольного параметра порядка при $h = 3$, $L = 24$ и $p = 0.2$ (■), 0.3 (▲), 0.4 (◆), 0.5 (□), 0.6 (○), 0.7 (*), 0.725 (△)

С целью дальнейшего выяснения свойств систем при $p_c < p < p_u$ была исследована температурная зависимость спин-стекольного параметра порядка. Полученные зависимости для различных концентраций примеси представлены на рис. 4. Из графиков видно, что при температуре T , стремящейся к нулю, в системе возникает спин-стекольное упорядочение, характеризующееся конфигурационным замораживанием ориентаций магнитных моментов атомов. Таким образом, при $p < p_u$ случайные магнитные поля приводят в модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями к смене антиферромагнитного основного состояния на спин-стекольное. При этом изменение состояния неупорядоченной системы для конечных температур характеризуется фазовым переходом первого рода из парамагнитного в смешанное состояние, представляющее собой при высоких спиновых концентрациях структуру, состоящую из совокупности антиферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы. С понижением спиновых концентраций в системе наблюдается сокращение числа и размеров антиферромагнитных доменов и увеличение числа и размеров ферромагнитных доменов при сокращении относительного объема спин-стекольной фазы.

Кривые фазовых переходов первого рода были определены на основе анализа температурных и полевых зависимостей намагниченности, внутренней энергии и теплоемкости. Как обобщение результатов исследований на рис. 5 представлена фазовая диаграмма системы в переменных (T, p) при $h = 3$.

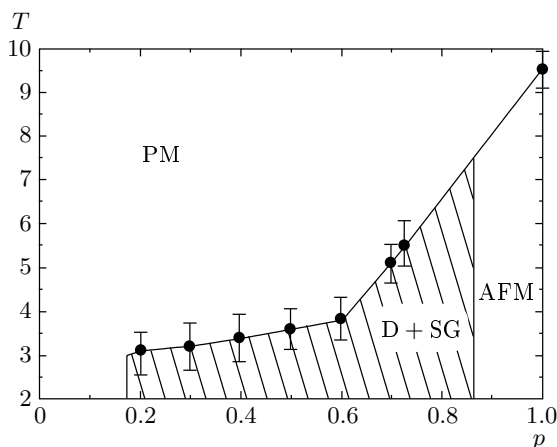


Рис. 5. Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга со случайными полями при $h = 3$: PM — парамагнетик, AFM — антиферромагнетик, D+SG — доменная структура и спиновое стекло

Таким образом, в работе на основе численного исследования методом Монте-Карло термодинамического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга со случайными магнитными полями наглядно показывается, что для спиновых концентраций, больших величины p_u — порога примесной перколяции, — реализуется фазовый переход второго рода из парамагнитного состояния в антиферромагнитное состояние, а в области спиновых концентраций $p_c < p < p_u$, где p_c — величина порога спиновой перколяции, — реализуется фазовый переход первого рода из парамагнитного состояния в смешанное состояние, характеризующееся сложной доменной структурой, состоящей из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы. При больших спиновых концентрациях доменная структура представляет собой систему антиферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы. С уменьшением спиновых концентраций и увеличением величины внешнего магнитного поля в системе осуществляется сокращение числа и размеров антиферромагнитных доменов и увеличение числа и размеров ферромагнитных доменов при сокращении относительного объема спин-стекольной фазы. Показано, что в области спиновых концентраций $p_c < p < p_u$ случайные магнитные поля приводят в данной трехмерной неупорядоченной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями к смене антиферромагнитного основного состояния на спин-стекольное.

Исследования поддержаны РФФИ (гранты №№ 04-02-17524, 04-02-39000) и Министерством образования РФ (грант № УР 01.01.230).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. В. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1993).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
3. В. С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
4. Y. Imry and S.-K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
5. G. Parisi and N. Sourlas, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 744 (1979).
6. J. Z. Imbrie, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1747 (1984).
7. J. Bricmont and A. Kupiainen, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1829 (1987).
8. A. P. Young and M. Nauenberg, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2429 (1985).
9. H. Rieger and A. P. Young, *J. Phys. A* **26**, 5279 (1993).
10. A. T. Ogielski and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1298 (1986).
11. A. T. Ogielski, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1251 (1986).
12. J. Cardy, *Phys. Rev. B* **29**, 505 (1984).
13. D. P. Belanger and A. P. Young, *J. Magn. Magn. Mat.* **100**, 272 (1991).
14. G. S. Grest, C. M. Soukoulis, and K. Levin, *Phys. Rev. B* **33**, 7659 (1986).
15. F. Ye, L. Zhou, and S. Larochelle, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 157202 (2002).
16. D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 449 (1972).
17. H. Muller-Krumbhaar and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **14**, 2014 (1976).
18. В. В. Прудников, О. Н. Марков, Е. В. Осинцев, *ЖЭТФ* **116**, 953 (1999).
19. K. Binder, *Z. Phys. B* **43**, 119 (1981).
20. В. С. Доценко, *УФН* **163**, 1 (1993).
21. E. Pytte, Y. Imry, and D. Mukamel, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1173 (1981).