

# ПЕРЕХОД ПЕРВОГО РОДА В ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМАХ С ПОЛНОСТЬЮ НАРУШЕННОЙ $O(3)$ -СИММЕТРИЕЙ

А. О. Сорокин\*, А. В. Сыромятников\*\*

Петербургский институт ядерной физики Российской академии наук  
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 19 ноября 2010 г.

С помощью метода Монте-Карло рассматриваются модели с полностью нарушенной  $O(3)$ -симметрией. Изучаются две модели классических гейзенберговских магнетиков в трех измерениях: слоисто-треугольная модель на кубической решетке и модель на слоисто-треугольной решетке с двумя конкурирующими антиферромагнитными взаимодействиями между слоями. В обеих моделях найден переход первого рода и псевдоуниверсальное поведение моделей для решеток малого размера.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы критическое поведение фрустрированных магнитных систем являлось предметом интенсивных исследований и дискуссий. С одной стороны, многочисленные эксперименты и вычисления методом Монте-Карло демонстрируют универсальное поведение этих систем. С другой — много данных указывает на некоторое отклонение от универсальности или на первый род перехода [1]. Кавамура [2] высказал гипотезу о существовании нового класса универсальности для фрустрированных систем. Он исследовал методом Монте-Карло гейзенберговский и XY-антиферромагнетик на слоисто-треугольной решетке и обнаружил, что наборы критических показателей для этих систем отличаются от соответствующих наборов для нефрустрированных магнетиков. Он провел  $\epsilon = 4 - d$  ренормгрупповой анализ этих моделей и показал [3], что гамильтониан в ней такой же, как для спиральных магнетиков [4] и для  $^3\text{He}$  [5]. В частности, он воспроизвел результат двухпетлевого счета для критического значения числа компонент спина  $N_c(d)$ , выше которого должен осуществляться переход второго рода:  $N_c(d) \approx 21.8 - 23.4\epsilon$ . Кавамура экстраполировал этот результат к  $d = 3$  и нашел  $N_c < 2$ . Поскольку для данной модели реализуется иной сценарий нарушения симметрии по сравнению с обыкновенными магнетиками,  $O(N) \rightarrow O(N - 2)$

вместо  $O(N) \rightarrow O(N - 1)$ , Кавамура предположил существование нового класса универсальности.

Универсальное поведение фрустрированных систем наблюдалось в эксперименте [6]. Критические показатели для соединений, в которых реализуется слоисто-треугольная решетка, таких как  $\text{CsMnBr}_3$ ,  $\text{CsNiCl}_3$  и др., или для некоторых спиральных магнетиков (например, Tb), согласуются с показателями, полученными Кавамурой и другими авторами [7] методом Монте-Карло. В изящном эксперименте [8] были измерены также критические показатели  $\beta_c$  и  $\gamma_c$ , относящиеся к киральному параметру порядка, соответствующему дополнительному нарушению симметрии. Эти результаты хорошо согласуются с численными данными [7].

Однако были выдвинуты аргументы против гипотезы Кавамуры. Дип [9] методом Монте-Карло исследовал спиральный магнетик на объемно-центрированной кубической решетке. Он обнаружил переход первого рода для XY-магнетика и второго рода для гейзенберговского магнетика с индексами, совпадающими с результатами [7]. Кунц и Цумбах [10] предложили обобщенную модель, где пространство параметра порядка является многообразием Штифеля  $V_{N,P} = O(N)/O(N - P)$ , описываемым множеством из  $P$  ортогональных единичных векторов в  $N$ -мерном пространстве. Для моделей  $V_{2,2}$  и  $V_{3,2}$  на простой кубической решетке, соответствующих новому классу универсальности, был обнаружен ярко выраженный переход первого рода [10, 11]. В этих моделях наблюдались гистерезис и двухпико-

\*E-mail: aosorokin@gmail.com

\*\*E-mail: syromyat@thd.pnpi.spb.ru

вая структура распределения по энергии при  $T_c$  даже для малых размеров решетки. Позже аналогичная структура распределения была найдена и в модели Кавамуры, но для очень больших размеров решетки [12, 13].

Главными аргументами против гипотезы Кавамуры являются результаты теоретических расчетов. В работе [14] Соколов с соавт. проделали вычисления в трех петлях для  $d = 3$  в теории возмущений по константе связи и для  $d = 4 - \varepsilon$ , получив результаты соответственно  $N_c(d = 3) = 3.91$  и  $N_c(d = 3) = 3.39$ . Сейчас эти результаты улучшены до шести петель разложения по теории возмущений при  $d = 3$  [15] и до пяти петель  $4 - \varepsilon$ -разложения [16] со значениями  $N_c(d = 3)$ , близкими к 6. Это фактически снимает вопрос о типе перехода, но не объясняет наблюдающуюся универсальность.

Возможное объяснение универсальности в отсутствие перехода второго рода нашел Цумбах [17]. Он заметил, что даже если на РГ-диаграмме отсутствует неподвижная точка, траектория эволюции параметров может проходить через область, в которой движение оказывается достаточно медленным, имитирующим скейлинговое поведение. Используя непerturbативный подход, он показал возможность «почти второго рода» для гейзенберговского магнетика, обнаружив область с достаточно медленной эволюцией параметров. Эти идеи были развиты в работах [18]. Было показано, что псевдоскейлинговое поведение наблюдается как для гейзенберговского, так и для XY-магнетика. Однако было показано также, что данное псевдоскейлинговое поведение возможно и без универсальности.

Во фрустрированных магнетиках реализуется множество различных сценариев нарушения симметрии [19]. В общем случае нарушенная симметрия имеет вид  $S_l \otimes O(N)/O(N - P)$ , где  $S_l$  — подгруппа симметрии решетки (чаще всего это 1,  $Z_2$  или  $Z_3$ ),  $P = 2, \dots, N$ . В трех измерениях для XY- и гейзенберговских магнетиков во всех исследованных моделях найден переход первого рода (см. работу [19] и ссылки в ней). В некоторых моделях возможен переход «почти второго рода», аналогично случаю антиферромагнетика на слоисто-треугольной решетке.

В данной работе методом Монте-Карло рассматриваются модели с полностью нарушенной  $O(3)$ -симметрией. Эти модели принадлежат тому же классу, что и  $V_{3,3}$ -модель Штифеля, исследованная в работах [10, 20], в которой обнаружен четкий первый род перехода. Мы рассмотрели две модели классических гейзенберговских магнетиков. Первая — на кубической решетке с тремя конкурирующими об-

менивающими обменами в слое (так называемая слоистая  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модель [19]), рассматривавшаяся в контексте изучения спиновых жидкостей [21]. Вторая — на слоисто-треугольной решетке с двумя конкурирующими антиферромагнитными взаимодействиями между слоями. В обеих моделях найден переход первого рода и псевдоуниверсальное поведение моделей для решеток малого размера.

## 2. МОДЕЛИ И МЕТОДЫ

В данной работе рассматриваются две модели фрустрированных гейзенберговских антиферромагнетиков. Одна из них описывается гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \left( J_1 \sum_j \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_k \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k + J_3 \sum_l \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l - J_{\parallel} \sum_m \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_m \right), \quad (1)$$

где  $\mathbf{S}_i$  — трехкомпонентный единичный вектор, суммирование ведется по всем узлам  $i$  простой кубической решетки, по всем ближайшим соседним узлам  $j$  в слое, по узлам  $k$ , следующим за ближайшими в слое, по узлам  $l$  третьего порядка дальности в слое, а  $m$ -суммирование — по ближайшим узлам из соседних слоев (рис. 1). Все константы связи  $J > 0$  и выбраны так, что  $J_1 = J_{\parallel} = 1$ .

В данной модели в зависимости от значения параметров  $J_2$  и  $J_3$  реализуются различные сценарии нарушения симметрии (рис. 2) [21]. Поскольку нас интересует полностью нарушенная  $O(3)$ -симметрия, мы должны выбирать параметры так, чтобы  $J_3 > J_2/2$  и  $J_3 > 1/4 - J_2/2$ . В частности, для упрощения удобно выбрать  $J_2 = 0$  и  $J_3 > 1/4$ , что было сделано в данной работе.

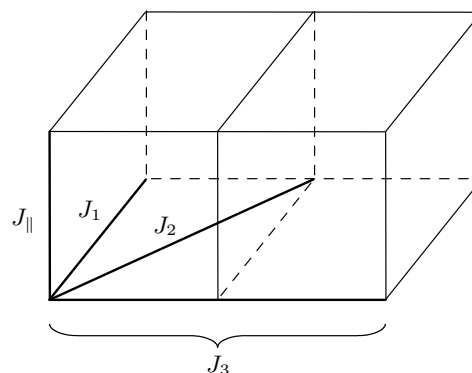


Рис. 1. Решетка модели с тремя об-

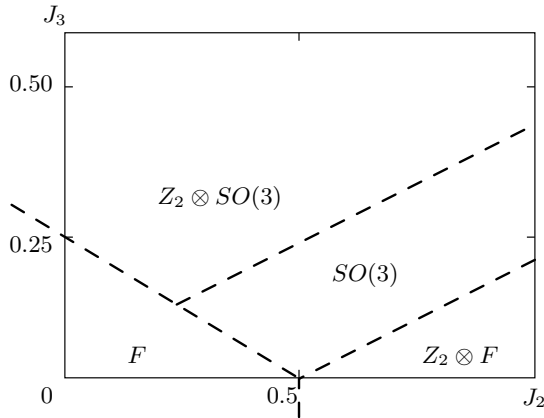


Рис. 2. Диаграмма нарушения симметрии для гейзенберговской слоистой  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модели.  $F = SO(3)/SO(2)$  — группа симметрии, нарушаемая в ферромагнетике и в антиферромагнетике без фрустрации

Вторая модель — это антиферромагнетик на слоисто-треугольной решетке с конкурирующими антиферромагнитными обменами между слоями. Модель описывается гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \left( J_p \sum_j \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_1 \sum_k \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k + J_2 \sum_l \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l \right), \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем ближайшим соседям  $j$  и  $k$ , а также по соседям, следующим за ближайшими между слоями (рис. 3). Мы выбрали константы связи так, чтобы  $J_p = J_1 = 1$ . В этих терминах для возникновения фрустрации должно соблюдаться условие  $J_2 > 1/4$ .

Данные модели исследуются методом Монте-Карло. Мы использовали стандартный алгоритм Метрополиса совместно с техникой анализа гистограмм.

Были выбраны периодические граничные условия, хотя это могло привести к дополнительным погрешностям. Обе рассматриваемые системы содержат спиральные структуры, для которых важно, чтобы размер решетки с периодическими граничными условиями был кратен шагу спирали. С помощью варьирования параметров обмена можно сделать шаг спирали равным целому числу постоянной решетки при нулевой температуре и рассматривать решетки размеров, кратных этому числу. Однако по-

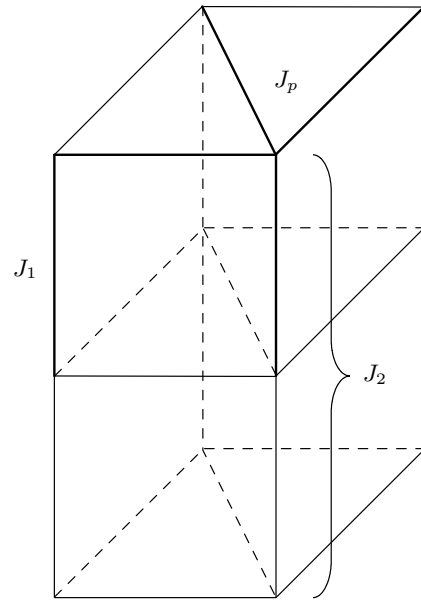


Рис. 3. Обмены в модели со слоисто-треугольной решеткой

грешности все равно возникнут из-за температурной зависимости шага спирали.

В обеих моделях мы имеем дело, по сути, с простейшей спиральной структурой — моделью с обменом второго порядка дальности вдоль одной оси. (Для системы с тремя обменами такая структура возникает при  $J_2 = 0$ .) Мы провели анализ этой модели на простой кубической решетке методом, аналогичным используемому в данной работе, и получили результат [22], согласующийся с результатами для антиферромагнетика на слоисто-треугольной решетке [7] и для спиральных магнетиков на объемно-центрированной кубической решетке [9]. Поскольку все эти системы принадлежат одному (псевдо)классу универсальности, мы должны обнаружить схожий набор критических индексов, по крайней мере для решеток небольшого размера. Были получены следующие результаты (для максимального размера решетки  $L = 27$ ):  $T_c = 1.180(2)$ ,  $\nu = 0.60(2)$ ,  $\beta = 0.30(2)$ ,  $\gamma = 1.21(5)$ ,  $\nu_k = 0.61(3)$ ,  $\beta_k = 0.53(3)$ ,  $\gamma_k = 0.79(6)$ . (Индексом  $k$  отмечены критические показатели, относящиеся к киральному параметру порядка.) Оказалось, что эффект температурной зависимости шага спирали для интересующей нас спиральной структуры замечен и приводит к дополнительным погрешностям, однако получить более или менее надежный результат все же можно.

В данной работе шаг спиралей выбирается равным трем шагам решетки. Для этого в модели с тре-

мя обмeнами полагается  $J_2 = 0$ ,  $J_3 = 0.5$ , а для модели со слоисто-треугольной решеткой выбирается  $J_2 = 0.5$ . Это вопрос исключительно удобства, поскольку шаг спирали не является существенным параметром для критического поведения системы [23]. Для обеих моделей рассматриваются решетки размером  $L^3$  с  $L = 12, 15, 18, 21, 24, 27, 30$  и  $36$ . (Рассмотрение решеток большего размера не представляет особого интереса, поскольку обе системы обнаруживают четкий первый род перехода уже для  $L = 36$ .) Для каждого измерения термализация проводилась в течение  $2 \cdot 10^5$  шагов алгоритма на спин, а набор статистики — в течение  $1.2 \cdot 10^6$  шагов.

В процессе измерения мы следили за первым, вторым и четвертым моментами распределения энергии и параметров порядка. Диапазон возможных значений этих величин разбивался на  $6.4 \cdot 10^5$  интервалов и составлялась гистограмма распределения. Под параметрами порядка подразумевается как намагниченность

$$m = \frac{1}{L^3} \sqrt{9 \sum_{i=1}^9 \langle \mathbf{m}_i^2 \rangle}, \quad (3)$$

где суммирование ведется по всем (девяти) подрешеткам, так и всевозможные киральности. В модели с тремя обмeнами вводились две киральные величины: величина  $k$ , определенная согласно

$$\mathbf{k} = \frac{2}{\sqrt{3}} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad k = \frac{1}{L^3} \sqrt{\langle \mathbf{k}^2 \rangle}, \quad (4)$$

где под  $(i + 1)$ -спином подразумевается следующий спин вдоль оси  $x$  в слое  $xy$ , и величина  $h$ , определенная аналогично (4), но вдоль направления  $y$ . В модели со слоисто-треугольной решеткой также рассматривались две киральные величины. Одна из них определена аналогично киральности в работах [7], а вторая  $h$  — аналогична (4), но в направлении  $z$  между слоями. Мы также следили за величиной  $\sigma = \mathbf{k} \cdot \mathbf{h}$ , которая является изинговым параметром порядка, соответствующим нарушению дополнительной  $Z_2$ -симметрии, однако все данные (величина параметра порядка, восприимчивость, кумулянты и т. д.), полученные для величин  $k$ ,  $h$  и  $\sqrt{\sigma}$  полностью совпадали в пределах точности наших вычислений.

Помимо параметров порядка мы следили и за другими величинами, необходимыми для анализа в теории конечномерного масштабирования [24, 25]:

$$C = \frac{1}{L^3 T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad (5)$$

$$U_E = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2}, \quad (6)$$

$$\chi_p = \frac{L^3}{T} (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2), \quad (7)$$

$$\chi'_p = \frac{L^3}{T} \langle p^2 \rangle, \quad (8)$$

$$U_p = 1 - \frac{\langle p^4 \rangle}{3 \langle p^2 \rangle^2}, \quad (9)$$

$$V_p^{(n)} = \frac{\langle p^n E \rangle}{\langle p^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad (10)$$

где  $E$  — энергия,  $T$  — температура,  $p = m, k$  или  $h$  — параметры порядка,  $\chi$  — восприимчивость,  $U$  — кумулянты Биндера четвертого порядка [26, 27], а  $V$  — кумулянты, необходимые для получения оценки показателя  $\nu$  [25]. Исследовалась зависимость величин (3)–(10) от температуры  $T$  и размера решетки  $L$ .

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

#### 3.1. Температура перехода

Для определения температуры перехода мы воспользовались методом пересечения кумулянтов (4)

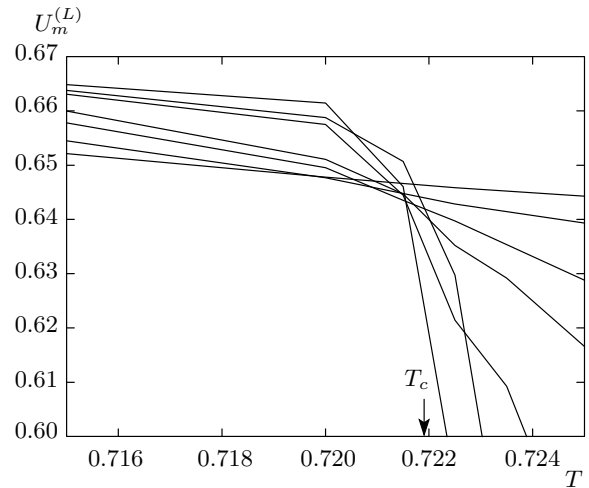


Рис. 4. Зависимость кумулянта  $U_m^{(L)}$  от температуры в модели на слоисто-треугольной решетке для различных значений  $L$

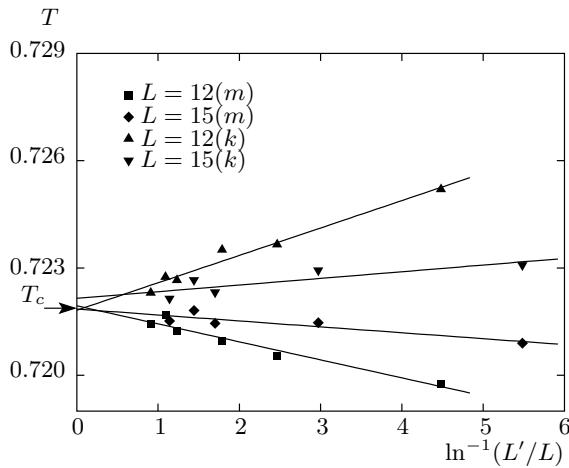


Рис. 5. Вычисление температуры перехода методом пересечения кумулянтов для модели на слоисто-треугольной решетке

$U_m$  и  $U_k$  [26]. Вычислена температура  $T_{L'}$ , при которой происходит пересечение кривых  $U_m^{(L')}$  и  $U_m^{(L')}$  (рис. 4) для разных размеров решетки  $L' > L$ , как функция от  $\ln^{-1}(L'/L)$ . Экстраполяция в термодинамический предел  $L' \rightarrow \infty$  должна давать температуру перехода  $T_{L'} \rightarrow T_c$  (рис. 5). Для модели на слоисто-треугольной решетке переход по магнитному параметру порядка происходит при температуре

$$T_c^{(m)} = 0.72193(6), \quad (11)$$

а по киральному параметру порядка при

$$T_c^{(k)} = 0.7220(1). \quad (12)$$

Для слоистой  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модели данные получились значительно хуже из-за погрешностей, связанных с температурными эффектами, обсуждавшимися выше. В модели на слоисто-треугольной решетке с конкурирующими обментами между слоями для возникающей дополнительной спиральной структуры температурные эффекты подавлены благодаря корреляции с киральностью самой треугольной решетки, у которой нет зависимости от температуры. Все погрешности в этом случае связаны с эффектами конечного размера системы. В слоистой  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модели температурные эффекты заметны. Поэтому для определения температуры перехода мы исключили из рассмотрения решетки с наименьшими размерами  $L = 12, 15$ . Были получены следующие значения для температур перехода (рис. 6):

$$T_c^{(m)} = 0.9217(8), \quad (13)$$

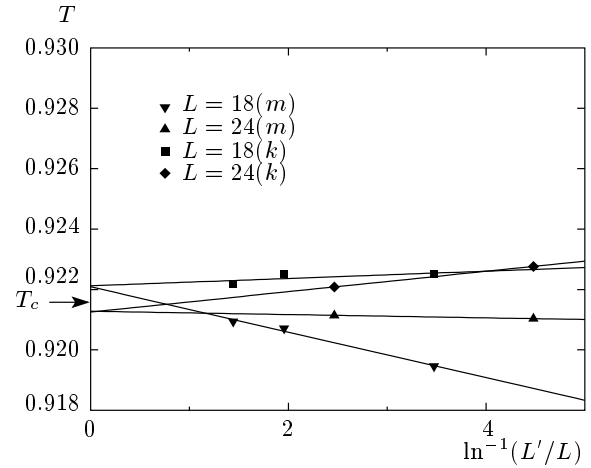


Рис. 6. Вычисление температуры перехода для модели с тремя обментами

$$T_c^{(k)} = 0.9217(9). \quad (14)$$

Этот результат был проверен иным способом. Вычисляется эффективная температура перехода  $T_c^{(L)}$  для системы размера  $L$ , определяемая положением максимума таких термодинамических величин как теплоемкость  $C$  и восприимчивость  $\chi$  [24]. Используя соотношение для сдвига эффективной температуры перехода относительно истинной, получаемое в теории конечномерного масштабирования для переходов первого рода,  $T_c^{(L)} - T_c = aL^{-3}$ , можно экстраполировать результаты для  $T_c^{(L)}$  к термодинамическому пределу  $L \rightarrow \infty$ . Воспользовавшись значениями  $T_c^{(L)}$  для наибольших размеров решетки, мы получили результат (рис. 7, 8):

$$T_c^{(L)} \rightarrow 0.9218(6), \quad L \rightarrow \infty, \quad (15)$$

согласующийся с (13) и (14).

Для обеих моделей температуры перехода по параметрам  $h$  и  $\sqrt{\sigma}$  неотличимы от  $T_c^{(k)}$ . Другими словами, согласованность  $T_c^{(h)}$  и  $T_c^{(k)}$  на несколько порядков выше, чем реальные погрешности, возникающие в теории конечномерного масштабирования. Различия в значениях  $T_c^{(m)}$  и  $T_c^{(k)}$  более заметны, но находятся в пределах точности нашего численного эксперимента.

### 3.2. Тип перехода

Для данных моделей мы ожидали обнаружить переход первого рода, как и для модели Штиффеля  $V_{3,3}$  с аналогичным сценарием нарушения симметрии [10, 20]. Авторы работы [10] обнаружили, что

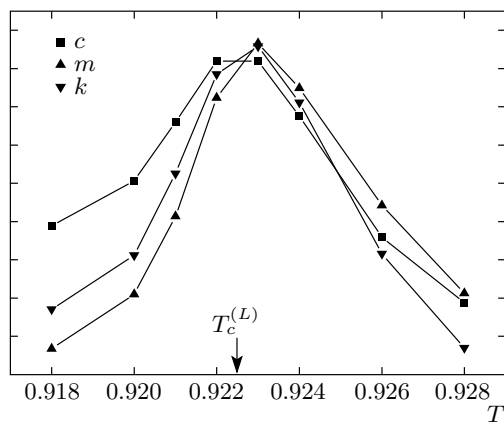


Рис. 7. Вычисление  $T_c^{(L)}$  через определение положения максимумов трех термодинамических функций для  $L = 36$  в модели с тремя обменами,  $T_c^{(36)} = 0.9225(5)$

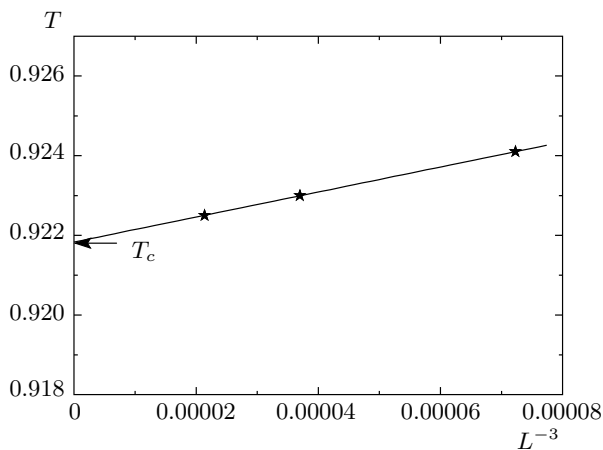


Рис. 8. Вычисление  $T_c$  экстраполяцией  $T_c^{(L)}$  к пределу  $L \rightarrow \infty$

критический показатель  $\eta$  для этой модели отрицательный, что невозможно в теории переходов второго рода [28]. В работе [20] был найден гистерезис по энергии и намагниченности даже для решеток не очень больших размеров.

Рассматриваемые нами модели не обнаруживают гистерезиса для решеток размера  $L = 36$  (рис. 9). Однако для данного размера системы имеют двухпиковую структуру распределения по энергии (рис. 10). Для модели с тремя обменами оба пика гистограммы разделены чуть хуже для решеток тех же размеров, чем в модели на слоисто-треугольной решетке, однако заметно для  $L = 36$ . По этому признаку в обеих моделях происходит переход первого рода.

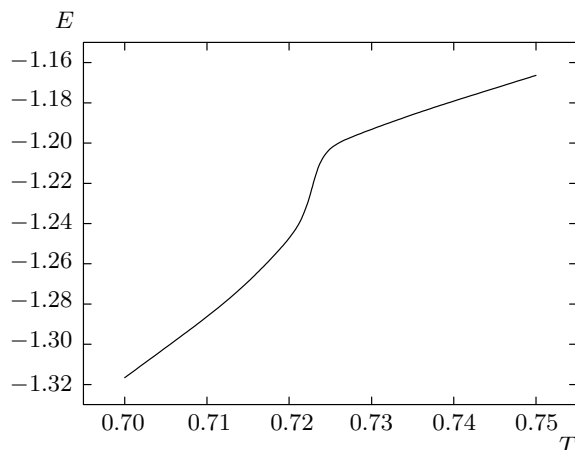


Рис. 9. Внутренняя энергия как функция температуры для решетки размером  $L = 36$  модели на слоисто-треугольной решетке. Мы не наблюдали петли гистерезиса в процессах «нагрева» и «охлаждения»

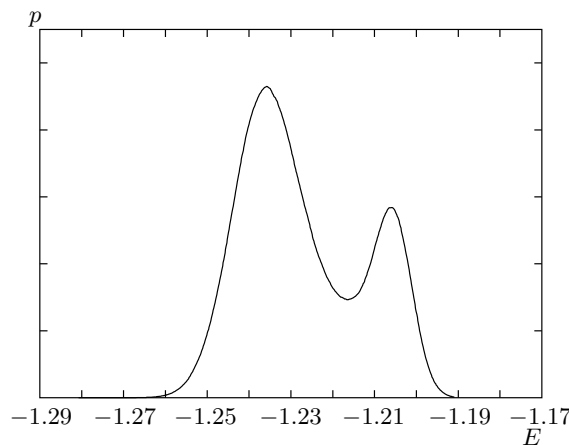


Рис. 10. Гистограмма распределения по энергии для модели на слоисто-треугольной решетке размера  $L = 36$  при температуре  $T = 0.7225$ , близкой к  $T_c^{(L)}$

Также мы исследовали тип перехода методом кумулянта Биндера  $U_E$  (6). Из теории конечномерного масштабирования следует, что значение минимума этой величины при экстраполяции к пределу  $L \rightarrow \infty$  должно равняться  $2/3$ , если наблюдается переход второго рода, и меньшему значению, если переход первого рода [27]. Используя при экстраполяции три наибольших размера решетки, мы получили следующие значения:

$$U_{min}^{(L)} \rightarrow 0.66660(4), \quad L \rightarrow \infty \quad (16)$$

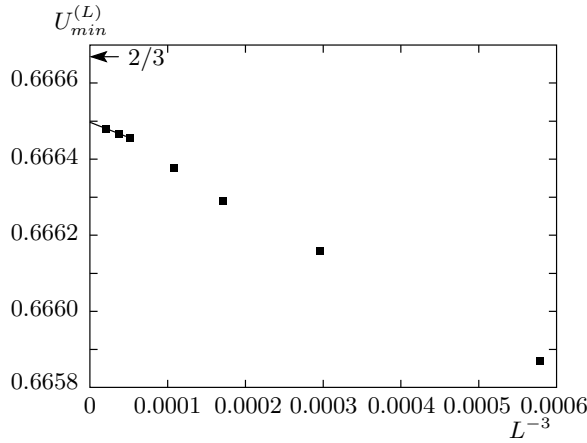


Рис. 11. Определение типа перехода методом кумулянта Биндера в модели на слоисто-треугольной решетке

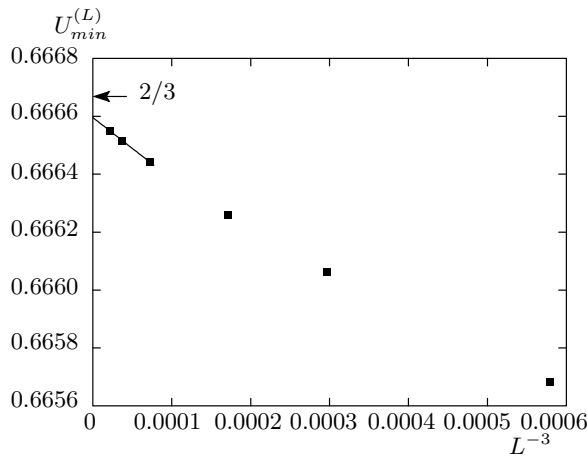


Рис. 12. Определение типа перехода методом кумулянта Биндера в модели с тремя обмeнами

в слоистой  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модели (рис. 11) и

$$U_{min}^{(L)} \rightarrow 0.66650(2), \quad L \rightarrow \infty \quad (17)$$

в модели на слоисто-треугольной решетке (рис. 12). В первом случае значение  $U_{min}^\infty$  очень близко к  $2/3$ , но все же отлично от него. Это означает, что и в модели с тремя обмeнами происходит переход первого рода. Таким образом, оба метода указывают на первый род перехода в обеих моделях.

### 3.3. Псевдоуниверсальное поведение

В рассматриваемых системах происходит переход первого рода, что четко видно уже для решеток

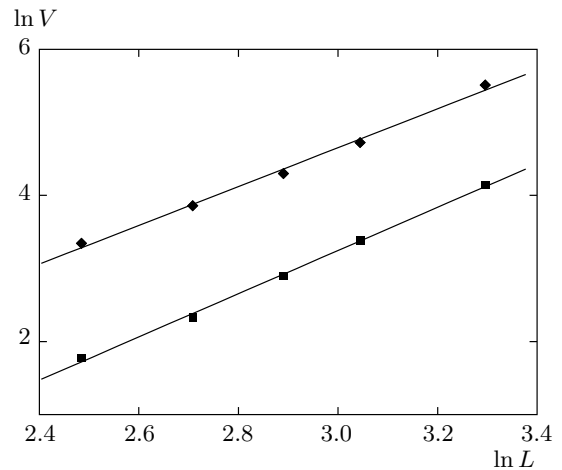


Рис. 13. Показатель  $\nu$  для магнитного и кирального параметров порядка в модели на слоисто-треугольной решетке:  $\blacksquare - V_m^{(1)} = \langle mE \rangle / \langle m \rangle - \langle E \rangle$ ,  $\blacklozenge - V_k^{(2)} = \langle k^2 E \rangle / \langle k^2 \rangle - \langle E \rangle$

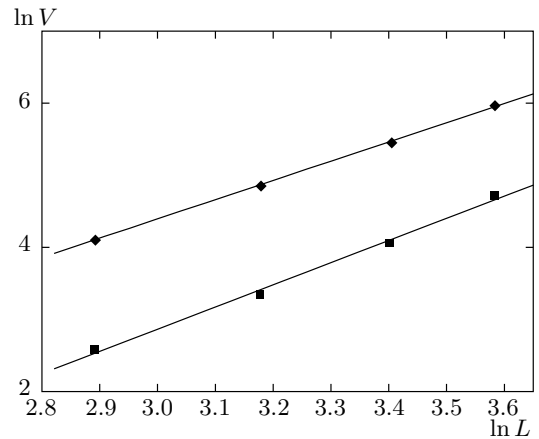


Рис. 14. Показатель  $\nu$  для магнитного и кирального параметров порядка в модели с тремя обмeнами:  $\blacksquare - V_m^{(1)} = \langle mE \rangle / \langle m \rangle - \langle E \rangle$ ,  $\blacklozenge - V_k^{(2)} = \langle k^2 E \rangle / \langle k^2 \rangle - \langle E \rangle$

размера  $L = 36$ . Для сравнения, в модели Кавамуры двухпиковая структура гистограмм становится различимой лишь для очень больших размеров решеток  $L = 120$  [13]. Однако и в нашем случае выясняется, что для тех размеров решеток, при которых эффекты со стороны перехода первого рода еще не видны, наблюдается псевдоуниверсальное поведение.

Для модели на слоисто-треугольной решетке эффекты перехода первого рода видны уже при размере решетки  $L = 30$ . Поэтому решетки  $L = 30$  и  $36$  мы исключаем из дальнейшего рассмотрения. Для

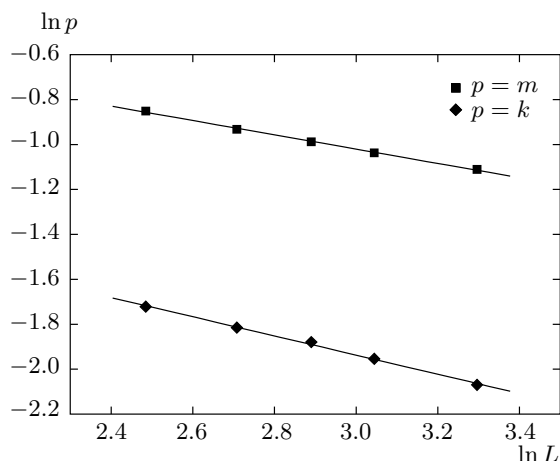


Рис. 15. Показатели  $\beta$  и  $\beta_k$  для магнитного параметра порядка в модели на слоисто-треугольной решетке

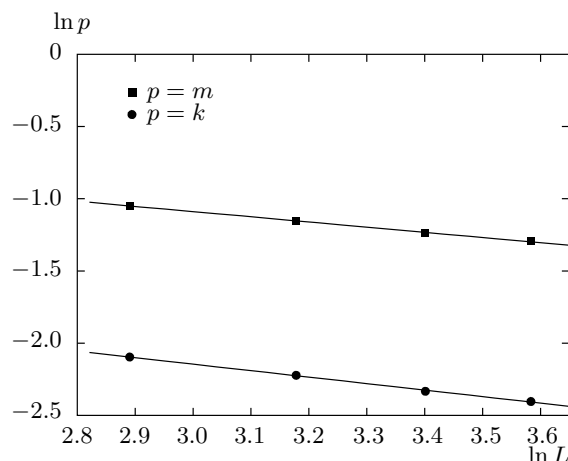


Рис. 17. Показатели  $\beta$  и  $\beta_k$  для магнитного параметра порядка в модели с тремя обмeнами

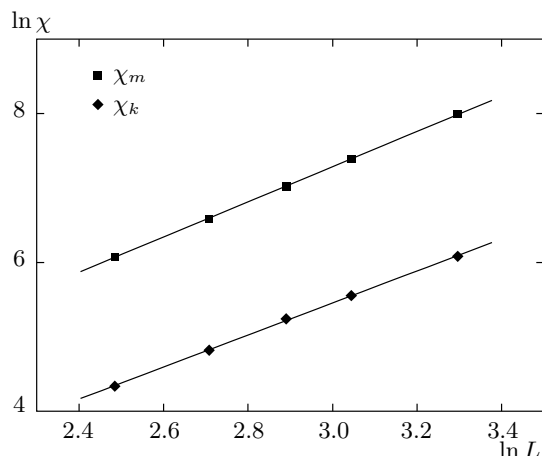


Рис. 16. Показатели  $\gamma$  и  $\gamma_k$  в модели на слоисто-треугольной решетке

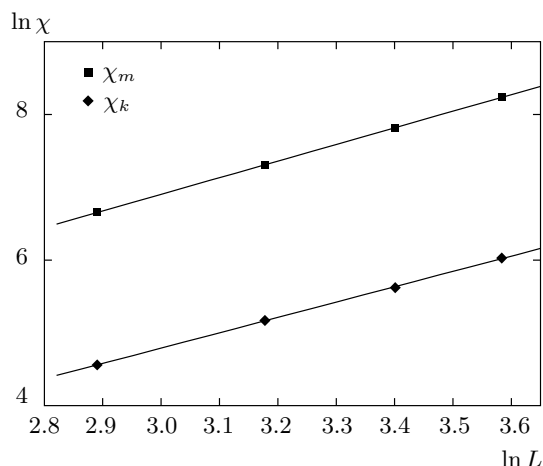


Рис. 18. Показатели  $\gamma$  и  $\gamma_k$  в модели с тремя обмeнами

модели с тремя обмeнами эффекты перехода первого рода появляются чуть позже. Гораздо существенней в данном случае эффекты со стороны температурной зависимости шага спирали и малого размера решетки. Поэтому для модели с тремя обмeнами мы исключим решетки с  $L = 12$  и  $L = 15$ .

Для вычисления индекса  $\nu$  мы находили максимумы величин  $V_m^{(n)}$ ,  $V_k^{(n)}$  и  $V_h^{(n)}$ , определенных в формуле (10), при  $n = 1, 2$  для различных  $L$ . Согласно теории конечномерного масштабирования эти величины ведут себя как  $V \sim L^{1/\nu}$ . Для слоисто-треугольной решетки мы получили следующие значения (рис. 13):

$$\nu^{(1)} = 0.37(1), \quad \nu^{(2)} = 0.371(7), \quad (18)$$

$$\nu_k^{(1)} = 0.371(9), \quad \nu_k^{(2)} = 0.38(1), \quad (19)$$

$$\nu_h^{(1)} = 0.370(8), \quad \nu_h^{(2)} = 0.378(9), \quad (20)$$

а в модели с тремя обмeнами (рис. 14)

$$\nu^{(1)} = 0.36(2), \quad \nu^{(2)} = 0.37(1), \quad (21)$$

$$\nu_k^{(1)} = 0.37(2), \quad \nu_k^{(2)} = 0.38(3), \quad (22)$$

$$\nu_h^{(1)} = 0.37(2), \quad \nu_h^{(2)} = 0.38(2). \quad (23)$$



**Таблица.** Сравнение критических показателей, полученных в данной работе с показателями для других систем,  $F = SO(3)/SO(2)$

	ФМ $F$ [29]	STA SO(3) [7]	Helix SO(3) [9]	$V_{3,2}$ SO(3) [11]	$V_{3,3}$ O(3) [10]	$J_1-J_2-J_3$ O(3) Данная работа	STA+ $J_2$ O(3) Данная работа
$T_c$	—	0.9577	1.0511	1.5312	1.6825	0.9217	0.7220
$\alpha$	-0.117	0.24	0.29	0.48	0.9	0.89	0.89
$\beta$	0.37	0.30	0.25	0.19	—	0.13	0.12
$\gamma$	1.39	1.17	1.22	1.14	0.9	0.84	0.88
$\nu$	0.71	0.59	0.57	0.51	0.37	0.37	0.37
$\eta$	0.04	0.02	-0.13	-0.24	-0.4	-0.3	-0.36
$\beta_k$	—	0.50	—	—	—	0.17	0.16
$\gamma_k$	—	0.82	—	—	—	0.78	0.80
$\nu_k$	—	0.60	—	—	—	0.38	0.37

Индексы  $\beta$  и  $\gamma$ , относящиеся как к магнитному  $m$ , так и к киральным параметрам порядка  $k$  и  $h$ , вычисляются из значений параметра порядка  $p$  и восприимчивости  $\chi'_p$  как функций размера решетки  $L$  в точке перехода  $T = T_c$ :  $p(T = T_c) \sim L^{-\beta_p/\nu_p}$ ,  $\chi_p(T = T_c) \sim L^{\gamma_p/\nu_p}$ . Для модели на слоисто-треугольной решетке мы получили следующие показатели (рис. 15, 16):

$$\beta = 0.118(7), \quad \gamma = 0.88(3), \quad (24)$$

$$\beta_k = 0.16(1), \quad \gamma_k = 0.80(4), \quad (25)$$

а для модели с тремя обменами (рис. 17, 18)

$$\beta = 0.13(1), \quad \gamma = 0.84(4), \quad (26)$$

$$\beta_k = 0.17(2), \quad \gamma_k = 0.78(5). \quad (27)$$

Для индексов, относящихся к параметру порядка  $h$ , значения совпадают с соответствующими индексами для  $k$ .

Индексы  $\nu$ ,  $\nu_k$  и  $\nu_h$  хорошо согласуются для обеих моделей как между собой, так и при сравнении обеих моделей. Также согласие в пределах точности наших вычислений наблюдается и между другими критическими показателями.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассматривались две модели классических гейзенберговских магнетиков, для ко-

торых реализуется сценарий нарушения  $O(3)$ -симметрии. Мы подтвердили гипотезу Кунца, Цумбаха и Луазона [10, 19, 20] о том, что подобные системы испытывают переход первого рода, аналогично  $V_{3,3}$ -модели Штифеля.

Мы также обнаружили, что системы ведут себя универсально, пока не становятся заметными эффекты перехода первого рода. Интересно сравнить полученные в данной работе показатели с результатом работы [10] (таблица). Оказывается, что рассмотренные нами системы имеют сходные критические индексы не только между собой, но и с  $V_{3,3}$ -моделью Штифеля.

Однако первый род перехода для рассмотренных систем можно считать четко установленным. Достаточным признаком является двухпиковая структура распределения по энергии, наблюдаемая для систем достаточно большого размера (рис. 10). Помимо этого, анализ, проведенный с помощью кумулянта Биндера, указывает на первый род перехода. Вычисленный показатель  $\eta = 2 - \gamma/\nu$  оказался сильно отрицательным, что невозможно при фазовом переходе второго рода. Все три признака для обеих систем указывают на первый род перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-329.2010.2 Президента РФ, РФФИ (грант № 09-02-00229) и в рамках программ «Квантовая физика конденсированных сред», «Сильнокоррелированные электроны в твердых телах и структурах» и «Нейтронные исследования вещества».

## ЛИТЕРАТУРА

1. B. Delamotte, D. Mouhanna, and M. Tissier, in *Frustrated Spin Systems*, ed. by H. T. Diep, World Scientific, Singapore (2004), Ch. 3, p. 107.
2. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **54** (1985) 3220; **55**, 2095 (1986).
3. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2157 (1986); Phys. Rev. B **38**, 4916 (1988).
4. T. Garel and P. Pfeuty, J. Phys. C **9**, L245 (1976).
5. D. R. T. Jones, A. Love, and M. A. Moore, J. Phys. C **9**, 743 (1976); D. Bailin, A. Love, and M. A. Moore, J. Phys. C **10**, 1159 (1977).
6. M. F. Collins and O. A. Petrenko, Can. J. Phys. **75**, 605 (1997).
7. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992); A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caillé, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
8. V. P. Plakhty, J. Kulda, D. Visser, E. V. Moskvina, and J. Wosnitza, Phys. Rev. Lett. **85**, 3942 (2000); S. V. Maleyev, Phys. Rev. Lett. **75**, 4682 (1995).
9. H. T. Diep, Phys. Rev. B **39**, 397 (1989); D. Loison, Physica A **275**, 207 (1999).
10. H. Kunz and G. Zumbach, J. Phys. A **26**, 3121 (1993).
11. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998); **14**, 125 (2000).
12. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 74 (2003).
13. V. Thanh Ngo and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **103**, 07C712 (2008).
14. S. A. Antonenko and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B **49**, 15901 (1994); S. A. Antonenko, A. I. Sokolov, and V. B. Varnashev, Phys. Lett. A **208**, 161 (1995).
15. A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. B **63**, 140414 (2001); P. Calabrese, P. Parruccini, and A. I. Sokolov, Phys. Rev. B **66**, 180403 (2002); **68**, 094415 (2003).
16. P. Calabrese and P. Parruccini, Nucl. Phys. B **679**, 568 (2004).
17. G. Zumbach, Phys. Rev. Lett. **71**, 2421 (1993); Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
18. B. Delamotte, D. Mouhanna, and M. Tissier, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000); Phys. Rev. B **61**, 15327 (2000); **67**, 134422 (2003); **69**, 134413 (2004).
19. D. Loison, in *Frustrated Spin Systems*, ed. by H. T. Diep, World Scientific, Singapore (2004), Ch. 4, p. 177.
20. D. Loison, Eur. Phys. J. B **15**, 517 (2000).
21. J. Ferrer, Phys. Rev. B **47**, 8769 (1992).
22. А. Сорокин, частное сообщение.
23. H. Kawamura, Progr. Theor. Phys. Suppl. **101**, 545 (1990).
24. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
25. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).
26. K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
27. K. Binder and D. P. Landau, Phys. Rev. B **30**, 1477 (1984); M. S. S. Challa, D. P. Landau, and K. Binder, Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986).
28. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982), Гл. X, §6, с. 329.
29. S. A. Antonenko and A. I. Sokolov, Phys. Rev. E **51**, 1894 (1995).