

КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

*А. К. Муртазаев**, *Ж. Г. Ибаев***

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

*Дагестанский государственный университет
367025, Малаккала, Россия*

Поступила в редакцию 29 июля 2010 г.

Методами Монте-Карло проведено исследование критических свойств анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями. Рассчитана область локализации точки Лифшица на фазовой диаграмме. С помощью соотношений теории конечно-размерного скейлинга вычислены критические индексы теплоемкости, восприимчивости и намагниченности при различных значениях параметра конкурирующего взаимодействия J_1 . Показано наличие в системе кроссовера к критическому поведению, характерному для мультикритической точки, с увеличением параметра J_1 .

1. ВВЕДЕНИЕ

Реальные магнитные материалы характеризуются большим разнообразием фаз и переходов между ними. Для точного количественного описания фазовых переходов и критических явлений в статистической физике применяются различные решеточные модели. В настоящее время интерес исследователей направлен на изучение моделей для описания реальных систем с учетом их конкретных кристаллографических особенностей и типов взаимодействия. Следует отметить, что с помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удалось точно решить лишь очень ограниченное количество задач такого рода. Поэтому для изучения моделей сложных магнитных материалов в настоящее время пользуются методами вычислительной физики [1–3].

В представленной работе проведено исследование критических свойств анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель) методами Монте-Карло. Эта модель применяется для качественного описания нового типа магнитного упорядочения в магнетиках — модулированных структур. Насчитывается

свыше ста [4] чистых материалов и их соединений, в которых наблюдаются подобные структуры.

Рассматриваемая модель настолько проста, что не может точно описать реальные магнитные материалы, но в целом дает правильную качественную картину поведения систем с модулированными фазами [5, 6].

2. МОДЕЛЬ

ANNNI-модель (рис. 1) появилась столетия назад для объяснения спирального магнитного порядка в тяжелых редкоземельных металлах [7–10]. Его гамильтониан на правильной кубической решетке для спиновых переменных $s = \pm 1$

$$H_{ANNNI} = -J \sum_{i,j} S_i S_j + J_1 \sum_{i,j} S_i S_{i+1} \quad (1)$$

приводит к ферромагнитному упорядочению ближайших пар спинов и антиферромагнитному следующих за ближайшими с интенсивностью $J_1 > 0$ вдоль оси z (J — параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов).

ANNNI-модель может быть точно решена только в одномерном случае [11], но тем не менее некоторые ее особенности хорошо установлены и для высоких размерностей. Для трехмерного случая тополо-

*E-mail: m_akai@iwt.ru

**E-mail: ibaev77@mail.ru

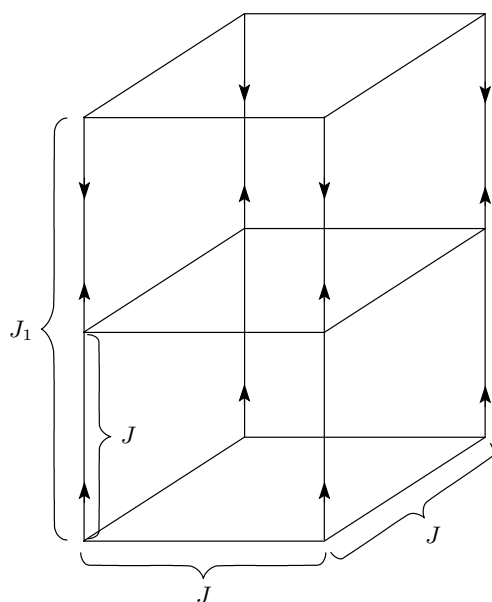


Рис. 1. Модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями

гия $T - |J_1/J|$ фазовой диаграммы (рис. 2) включает три области, пересекающиеся в мультикритической точке Лифшица [12]. При высоких температурах система парамагнитна, при низких температурах и малых значениях $|J_1/J|$ — ферромагнитна, а при достаточно больших значениях $|J_1/J|$ образуются модулированные фазы.

Согласно литературным данным с ростом $|J_1/J|$ до точки Лифшица система, описываемая ANNNI-моделью, испытывает фазовый переход второго рода «ферромагнетик–парамагнетик», переход «модулированная фаза–парамагнетик» после точки Лифшица относят к XY-классу универсальности критического поведения [13] и низкотемпературное основное состояние при $|J_1/J| > 1/2$ является антиферромагнитным с волновым числом $q = 1/4$ (два вверх, два вниз). Для детального описания фазового поведения системы, описываемой рассматриваемой моделью, были использованы приближенные теоретические методы, включая высоко- и низкотемпературные разложения [14, 15], теорию среднего поля [16] и другие теоретические аппроксимации [17–19].

Моделирование методом Монте-Карло [11, 20–22], в основном, проведено в области перехода «ферромагнетик–парамагнетик» до точки Лифшица [23], но точное определение перехода в самой точке и ближайшей ее окрестности осталось нерешенной задачей.

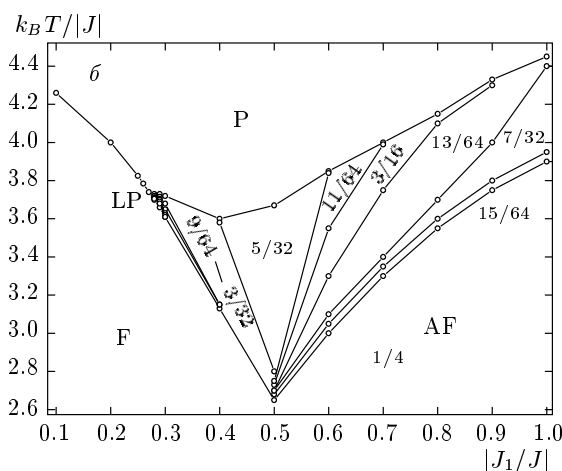
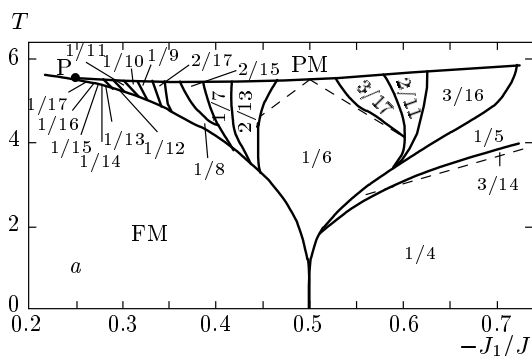


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями, рассчитанная а) по теории среднего поля [17], б) методами Монте-Карло [32]

Критические параметры ANNNI-модели, полученные перечисленными выше методами, представлены в табл. 1.

Согласно данным этой таблицы критическое поведение систем с модулированными структурами ниже точки Лифшица описывается изинговским классом универсальности критического поведения. С повышением температуры происходит кроссовер к критическому поведению, характерному для точки Лифшица, и от него к XY-классу критического поведения [24, 28].

Последние наиболее точные критические показатели в точке Лифшица получены с помощью анизотропного скейлинга [23]. Заметим также, что в более ранних Монте-Карло-исследованиях переходов от неупорядоченной высокотемпературной фазы к упорядоченным низкотемпературным фазам использовался алгоритм, основанный на перевороте одного спина [22, 29].

Таблица 1. Литературные данные по критическим параметрам ANNNI-модели

$ J_1/J $	$k_B T_c/ J $	α	β	γ	ν	ν_z	Источник
Ниже точки Лифшица							
0.15	4.15(2)		0.30(6)	1.20(6)	0.61(3)		МК [22]
< 0.2				1.24			ВТР [24]
0.24	3.86(2)		0.23(3)	1.26(6)			МК [22]
Вблизи точки Лифшица							
0.265–0.27	3.77(2)		0.19(3)	1.40(6)	0.51(3)	0.33(3)	МК [22]
0.285–0.4				1.5			ВТР [17]
		0.44					ВТР [17]
В точке Лифшица							
0.270 ± 0.005	3.73 ± 0.03	0.2	1/4	5/4		5/16	ε -раз [24]
			0.21(3)	1.36(3)			МК [22]
		0.20(15)		1.62(12)	0.40(3)		АП [25]
0.270 ± 0.004	3.748 ± 0.005	0.18(2)	0.238(5)	1.36(3)			МК [26]
		0.160	0.220	1.399			СП [27]
Выше точки Лифшица							
0.46–1.25				1.32			ВТР [25]
0.6	3.82(3)				1/1.4		МК [11]
> 2				1.24			ВТР [25]

Примечание. МК — методы Монте-Карло, ВТР — высокотемпературные разложения, АП — метод аппроксимантов Паде, ε -раз — ε -разложение, СП — теория среднего поля.

3. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ И КОНЕЧНО-РАЗМЕРНЫЙ СКЕЙЛИНГ

Методами Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса исследовались системы кубической формы с периодическими граничными условиями и размерами $L \times L \times L$, $L = 12$ –64. Число спинов в моделируемых системах при этом составляло $N_{eff} = 512$ –262144. На ЭВМ генерировались марковские цепи длиной $\tau = 100\tau_0$ ($\tau_0 = 10^4$ МК-шагов/спин — длина неравновесного участка). Путем усреднения вдоль этой цепи вычислялись термодинамические параметры системы. Кроме того, выполнялось усреднение по десяти различным начальным конфигурациям. При этом погрешность полученных результатов не превышает размеры используемых на рисунках символов.

В этой статье представлены результаты систе-

матического моделирования критических свойств анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями. Остается только добавить, что в современной вычислительной физике не разработан алгоритм для более точного исследования ANNNI-модели на всей области изменения параметров $|J_1/J|$ и T .

Использование высокоточных кластерных алгоритмов, в частности однокластерного алгоритма Вульфа [30], хотя и позволяет исследовать рассматриваемую систему в области фазового перехода второго рода, практически не дает никаких результатов в области модулированных фаз и ближайшей окрестности точки Лифшица. Предлагаемые в литературе [26, 29] модификации известных алгоритмов призваны, в основном, решать небольшие частные проблемы модели. Единственный алгоритм метода

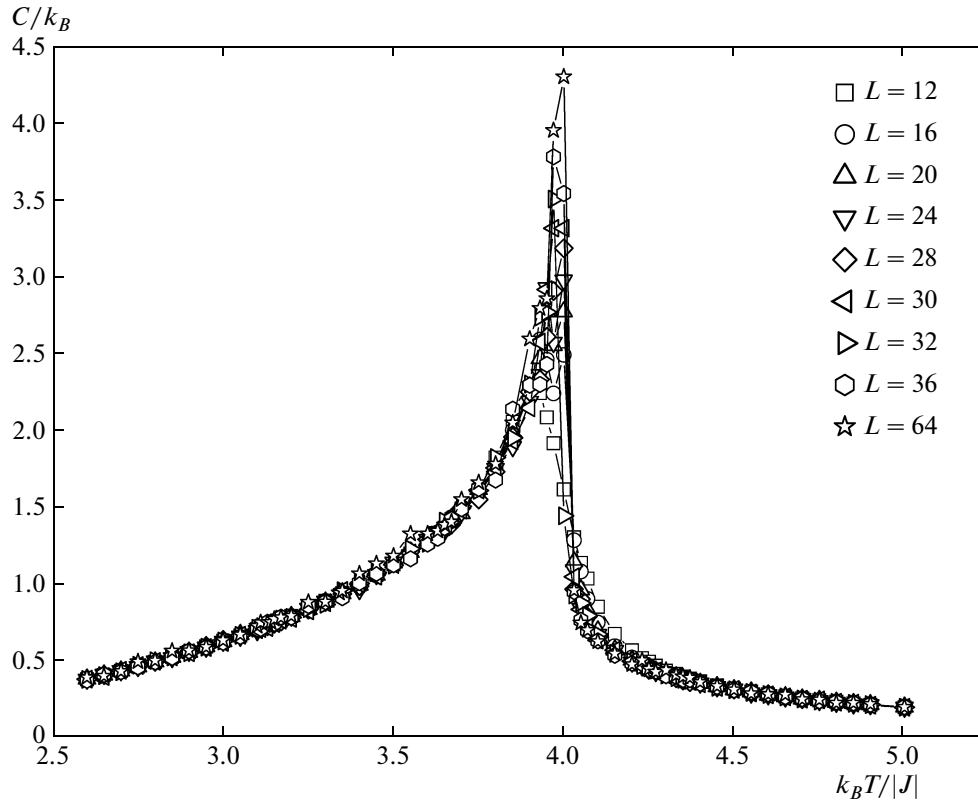


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости

Монте-Карло, который не потерял своей эффективности для данной модели в любом интервале изменения параметров $|J_1/J|$ и T , — классический алгоритм Метрополиса. Хотя точность алгоритма не высокая, полученные результаты позволяют представить картину термодинамического и критического поведения ANNNI-модели.

Для непосредственного вычисления критических параметров использовались соотношения теории конечно-размерного скейлинга (КРС), см. ссылки в работах [3, 31].

Основные положения теории сводятся к тому, чтобы учесть влияние конечных ($L \ll \infty$) размеров систем, изучаемых методами Монте-Карло, на скейлинговые соотношения. В соответствии с этой теорией свободная энергия достаточно большой системы ($L \gg 1$) с периодическими граничными условиями при температуре близкой к T_c ($T \rightarrow T_c$) масштабируется следующим образом [3, 31]:

$$F(T, L) = L^{-d} F(tL^{1/\nu}), \quad (2)$$

где d — размерность пространства, $T_c = T_c(L = \infty)$,

ν — статистический критический индекс радиуса корреляции бесконечно большой системы.

Выражение (2) приводит к аналогичным зависимостям для теплоемкости, восприимчивости и намагниченности, приходящихся на один спин:

$$C(T, L) \approx L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (3)$$

$$\chi(T, L) \approx L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (4)$$

$$m(T, L) \approx L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}). \quad (5)$$

Соотношения (3)–(5) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечно больших систем при $t \ll 1$ и $L \rightarrow \infty$. Особенно сильно возросла эффективность применения этой теории после того, как для расчета критической температуры стал использоваться метод кумулянтов Биндера [15]. Согласно теории КРС, кумулянты

$$U_L = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2 \quad (6)$$

для систем с разными размерами L пересекаются в критической точке T_c . Таким образом, построив температурные зависимости U_L для систем с разными размерами L можно с высокой степенью точности вычислить критические температуры систем.

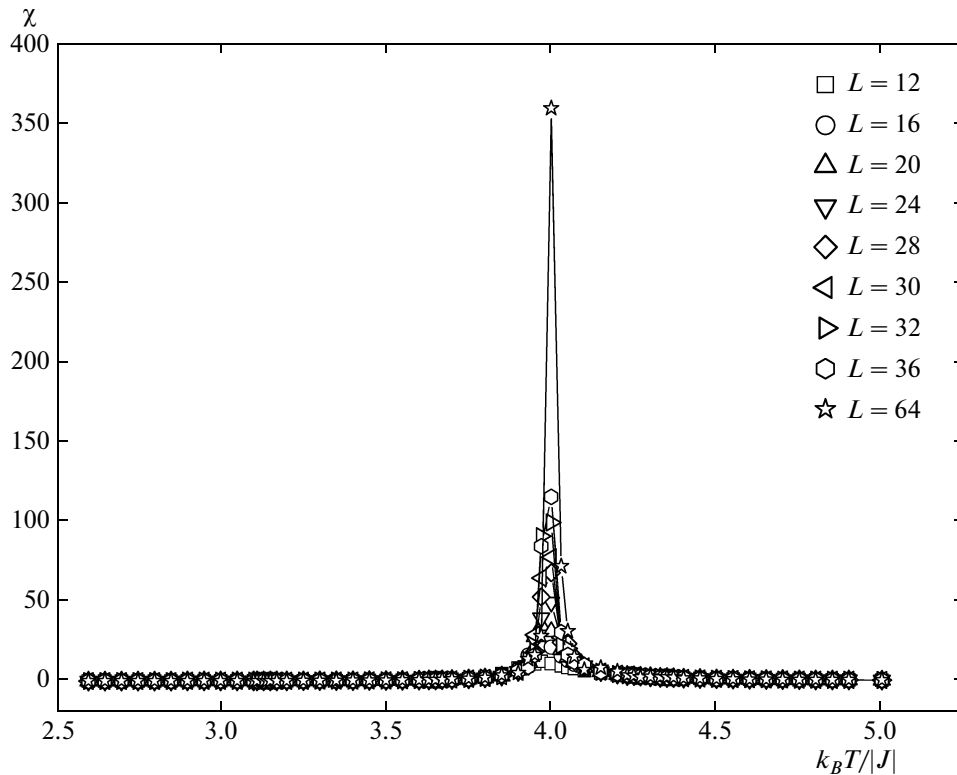


Рис. 4. Зависимость восприимчивости от температуры

4. СТАТИЧЕСКИЕ КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ANNNI-МОДЕЛИ

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использовались выражения [16]

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (7)$$

$$\chi = (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (8)$$

где $K = |J|/k_B T$, U — внутренняя энергия, m — подрешеточная намагниченность.

Отметим, что согласно литературным данным и результатам, полученным нами ранее [32], фазовый переход второго рода «ферромагнетик–парамагнетик» наблюдается для отношения параметров взаимодействия $|J_1/J| < 0.28$. Поэтому все результаты, представленные нами в этой работе, относятся к данной области изменения параметра $|J_1/J|$.

На рис. 3–5 представлены температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и намагниченности при $|J_1/J| = 0.2$. Такие же зависимости наблюдаются и для остальных значений параметра $|J_1/J|$. На них видно, что все системы имеют ярко

выраженные максимумы и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Отсутствие смещения пиков теплоемкости и восприимчивости с изменением L , их хорошее совпадение в пределах погрешности между собой по температуре и значениям, определенным по методу кумулянтов Биндера, свидетельствует о надежности определения критической температуры.

Характерная зависимость кумулянтов Биндера от температуры для систем с разными линейными размерами показана на рис. 6.

Определенные таким образом температуры переходов для различных значений $|J_1/J|$ представлены в табл. 2. Эти значения хорошо согласуются с температурами T_c , определенными из максимумов теплоемкости и восприимчивости.

Для расчета критических параметров восприимчивости и намагниченности использовались соотношения (4), (5). Из этих выражений следует, что при $T = T_c$ и достаточно больших L

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (9)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (10)$$

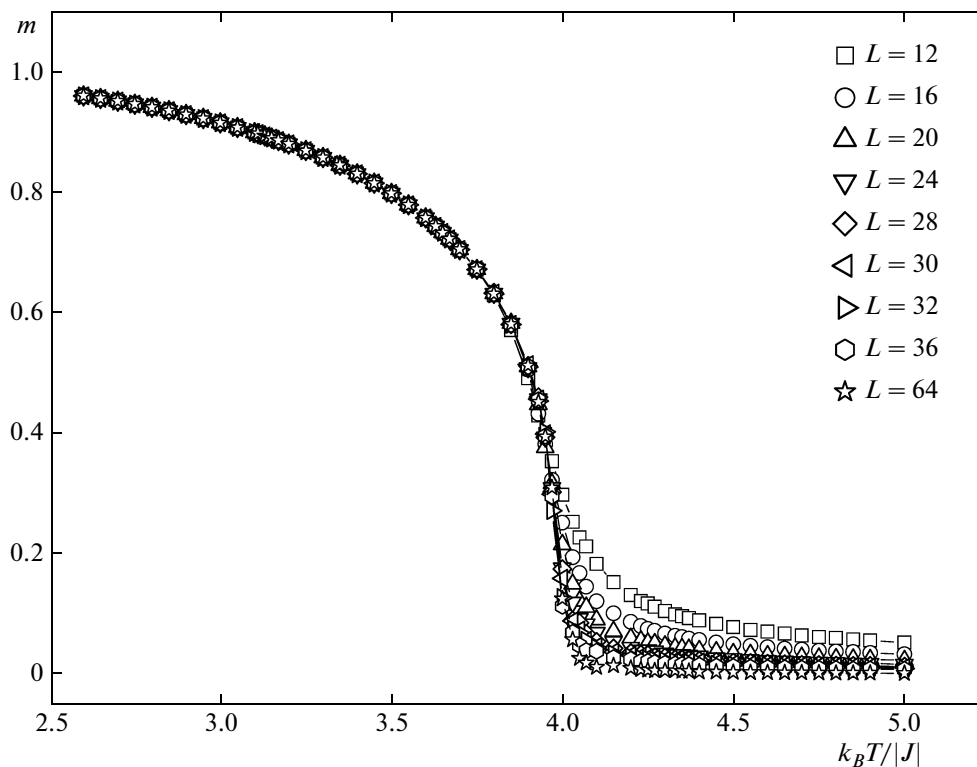


Рис. 5. Зависимость намагниченности от температуры

Таким образом, наклон прямой в логарифмических зависимостях χ и m от L дает значения γ/ν и β/ν . Зная значения ν для соответствующих моделей, легко определить γ и β . Характерная зависимость восприимчивости при $T = T_c$ от L при $|J_1/J| = 0.2$ показана на рис. 7. Эти и аналогичные данные для других соотношений $|J_1/J|$, а также для намагниченности во всех трех моделях были использованы для расчета индексов γ и β .

Удивительным фактом является то, что для теплоемкости закономерность типа (9), (10) не выполняется, с чем сталкивались исследователи и ранее [33], но особого значения этому не придавали, считая, что это присуще только некоторым моделям. Позднее в работе [1] было убедительно показано, что такое поведение присуще гораздо более широкому классу моделей. Поэтому на практике для расчета критического индекса α используются соотношения [3, 31]

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (11)$$

где a — некоторый коэффициент. Другой важный вопрос, который возникает при использовании выражений (9)–(11), это выбор ν . После того как определены конкретные значения γ/ν , β/ν и α/ν , от вы-

бранного значения ν зависит, чему будут равны индексы α , β , γ . Когда мы имеем дело с простыми моделями (Изинг, XY-модель или Гейзенберг) — все просто и очевидно: для каждой модели необходимо использовать соответствующие значения, $\nu = 0.63$, $\nu = 0.67$, $\nu = 0.71$ [34, 35]. Ситуация меняется в сложных моделях, в которых возможны кроссоверные переходы.

При обработке данных для таких моделей, как правило, используются значения, соответствующие главному члену в гамильтониане, например, для гамильтониана (1) это член, описывающий обменные взаимодействия ближайших соседей, и для него $\nu = 0.63$ (модель Изинга). Поэтому для всех рассматриваемых значений нами было использовано значение $\nu = 0.63$, соответствующее модели Изинга.

Значения критических параметров, полученные нами на основе выражений (9)–(11), представлены в табл. 2.

По этим данным видно, что значения критических индексов, полученные при $|J_1/J| \leq 0.25$, близки к значениям, характерным для модели Изинга и в пределах погрешности совпадают с теоретически-

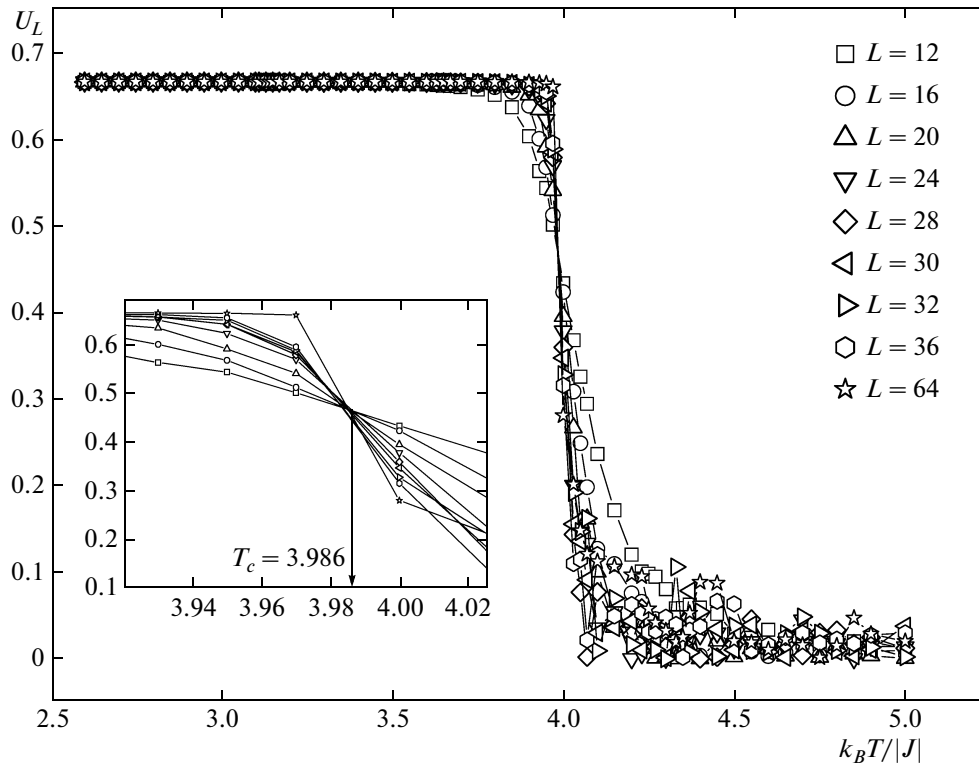


Рис. 6. Зависимость кумулянтов Биндера от температуры

Таблица 2. Критические параметры ANNNI-модели

$ J_1/J $	T_c	α/ν	β/ν	γ/ν	ν	α	β	γ
0.1	4.260	0.166	0.523	1.97	0.63	0.104(1)	0.329(1)	1.244(1)
0.2	4.000	0.171	0.509	2.00		0.107	0.320	1.262
0.25	3.825	0.174	0.517	2.05		0.109	0.325	1.293
0.26	3.785	0.215	0.496	2.12		0.135	0.312	1.333
0.27	3.740	0.311	0.435	2.20		0.195	0.271	1.384
Изинг	4.511					0.113	0.3258	1.239

ми значениями. Изинговский характер критического поведения этих моделей согласуется с ожидаемым из гамильтониана.

С увеличением абсолютного значения параметра $|J_1/J|$ (при приближении к точке Лифшица) наблюдается рост значений критических индексов теплоемкости и восприимчивости, а значения индекса β , наоборот, испытывают некоторое уменьшение с ростом $|J_1/J|$.

Таким образом, можно утверждать, что в исследуемой нами модели точка Лифшица локализована

в области $0.27 < |J_1/J| < 0.28$ и $3.72 < T < 3.76$ и по характеру изменения критических индексов модель с ростом параметра $|J_1/J|$ испытывает кроссовер к критическому поведению, характерному для мультикритической точки.

Сравнение значений критических индексов, полученных нами, со значениями, представленными в табл. 1, свидетельствует о хорошем качественном согласии этих индексов друг с другом.

Разработка новых алгоритмов моделирования может не только способствовать изучению ближай-

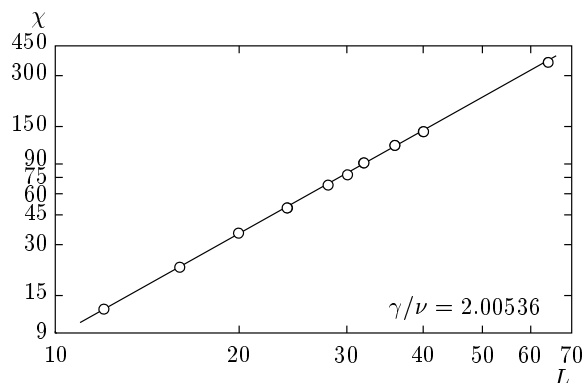


Рис. 7. Двойная логарифмическая зависимость восприимчивости от линейных размеров системы при $|J_1/J| = 0.2$, $T = T_c$

шей окрестности точки Лифшица, но и получить более точные значения параметров самой этой точки.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **120**, 1535 (2001).
2. P. Peczak and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 1048 (1991); Phys. Rev. B **47**, 14260 (1993).
3. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
4. Ю. А. Изюмов, *Дифракция нейтронов на длинно-периодических модулированных структурах*, Энергоатомиздат, Москва (1987).
5. W. Selke, Phys. Rep. **170**, 213 (1988).
6. B. Neubert, M. Pleimling, and R. Siems, Ferroelectrics **141**, 208 (1998).
7. W. Selke, Phys. Rep. **170**, 213 (1988).
8. R. J. Elliott, Phys. Rev. **124**, 346 (1961).
9. J. Yeomans, E. Henry, and T. David, Sol. St. Phys. **41**, 151 (1988).
10. W. Selke, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Academ. Press, London (1992), т. 15, p. 254.
11. W. Selke and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **20**, 257 (1979).
12. R. M. Hornreich, M. Luban, and S. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **35**, 1678 (1975).
13. T. Garel and P. Pfeuty, J. Phys. C **9**, L245 (1976).
14. S. Redner and H. E. Stanley, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **10**, 4765 (1977); Phys. Rev. B **16**, 4901 (1977).
15. M. E. Fisher and W. Selke, Phi. Trans. Roy. Soc. Lond. **302**, 1 (1981).
16. W. Selke and P. M. Duxbury, Z. Phys. B **57**, 49 (1984).
17. P. Bak and J. Boehm, Phys. Rev. B **21**, 5297 (1980).
18. A. Surda, Phys. Rev. B **69**, 134116 (2004).
19. A. Gendiar and T. Nishino, Phys. Rev. B **71**, 024404 (2005).
20. W. Selke and M. E. Fisher, J. Mag. Mag. Mater. **15-8**, 403 (1980).
21. E. B. Rasmussen and S. J. Knak-Jensen, Phys. Rev. B **24**, 2744 (1981).
22. K. Kaski and W. Selke, Phys. Rev. B **31**, 3128 (1985).
23. M. Pleimling and M. Henkel, Phys. Rev. Lett. **87**, 125702 (2001).
24. J. Oitmaa, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 365 (1985).
25. Z. Mo and M. Ferer, Phys. Rev. B **43**, 10890 (1991).
26. M. Henkel and M. Pleimling, Comp. Phys. Comm. **147**, 161 (2002).
27. M. Shpot and H. W. Diehl, Nucl. Phys. B **612**, 340 (2001).
28. Y. Muraoka, T. Kasama, and T. Idogaki, J. Magn. Magn. Mater. E **995**, 272 (2004).
29. W. Selke, Z. Physik B **29**, 133 (1978).
30. U. Wolf, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
31. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1980).
32. А. К. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, ФНТ **35**, 1011 (2009).
33. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. **43**, 6097 (1991).
34. S. A. Antonenko and A. I. Sokolov, Phys. Rev. E **51**, 1894 (1995).
35. J. J. C. La Gulluo and J. Zinn-Justin, J. Phys. Lett. (Paris) **46**, L137 (1985).