

О ВЫБОРЕ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА МОДУЛИРОВАННЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР

*А. К. Муртазаев**, *Ж. Г. Ибаев***

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

*Дагестанский государственный университет
367025, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 28 апреля 2012 г.

Исследованы длиннопериодические модулированные структуры в анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель) методами Монте-Карло. Для описания модулированных структур предложен новый параметр порядка в виде амплитуды модулированной фазы. Показано, что использование амплитуды в качестве параметра порядка позволяет исследовать свойства фазового перехода модулированная фаза–парамагнетик.

DOI: 10.7868/S0044451013020090

1. ВВЕДЕНИЕ

В природе помимо материалов с простыми ферромагнитными или антиферромагнитными структурами существует широкий класс материалов с новым типом магнитного упорядочения — длиннопериодические модулированные структуры [1]. Одним из примечательных свойств материалов с такими структурами является наличие больших барьеров свободной энергии между различными модулированными структурами, что позволяет им сохранять свои свойства при значительных внешних воздействиях. Интерес к исследованию таких веществ обусловлен не только их необычными физическими свойствами, но и расширением их технического применения в качестве термопластичных материалов и шаблонов наноструктур [2]. Изучению этих свойств посвящены как экспериментальные, так и теоретические работы [1, 3], а в последнее время в их исследовании значительно возросла роль методов вычислительной физики, в частности, методов Монте-Карло и молекулярной динамики [4–7].

Заметим, что использование известных кластерных алгоритмов метода Монте-Карло (кластерные алгоритмы Вульфа и Свенсена–Янга) не позволя-

ет наблюдать модулированные структуры, что обусловлено отсутствием простых структурных перестановок. Единственный алгоритм, который не потерял своей актуальности для исследования таких систем, это классический алгоритм Метрополиса [8]. Поэтому в данной работе приведены результаты, полученные при исследовании модулированных структур классическим алгоритмом Метрополиса.

2. МОДЕЛЬ

Длиннопериодические модулированные структуры могут быть исследованы с помощью модели Изинга с анизотропными конкурирующими взаимодействиями соседей, следующих за ближайшими. Это так называемая ANNNI-модель (рис. 1), которая описывается гамильтонианом [9]

$$H_{ANNNI} = -J \sum_{i,j} s_i s_j + J_1 \sum_i s_i s_{i+2}, \quad (1)$$

где первый член описывает ферромагнитное взаимодействие ближайших пар спинов с интенсивностью $J > 0$, а второй — конкурирующее взаимодействие спинов, следующих за ближайшими вдоль оси z , параметр этого взаимодействия $J_1 < 0$, $s_i = \pm 1$.

Фазовая диаграмма этой модели, полученная методами Монте-Карло, представлена на рис. 2 [5, 9]. Отличительной особенностью данной модели является наличие на ее фазовой диаграмме мультикрити-

*E-mail: akai2005@mail.ru

**E-mail: ibaev77@mail.ru

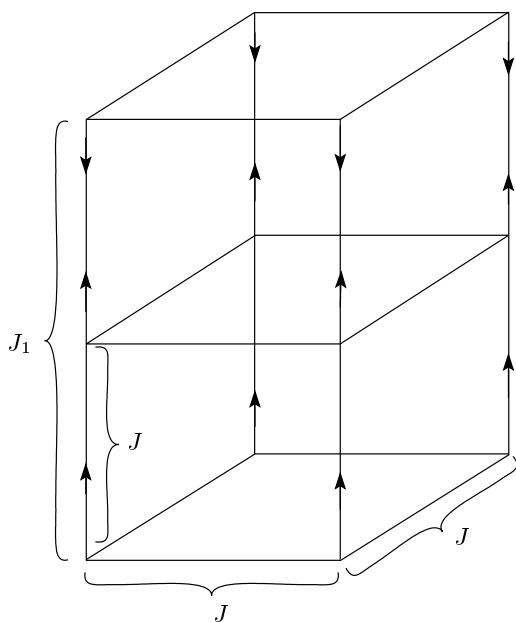


Рис. 1. ANNNI-модель

ческой точки Лифшица и широкой области с модулированными фазами [5, 6]. Хотя модулированный режим является центральной особенностью данной модели, именно он изучен меньше всего.

3. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

При исследовании фазовых переходов одной из основных задач является правильный выбор параметра порядка. Как известно, при теоретическом, экспериментальном и численном исследовании магнитных материалов в качестве параметра порядка выбирается намагниченность системы (в случае ферромагнетика), намагниченность подрешетки (в случае антиферромагнетика, ферримагнетика). Поэтому нам представляется, что необходимо подобрать параметр, более корректно отражающий свойства модулированных структур. Эти структуры характеризуются такими параметрами, как длина волны (волновой вектор), амплитуда и фаза. Наиболее подходящим и простым параметром, характеризующим наличие упорядочения, на наш взгляд, является амплитуда волны модуляции.

Для проверки пригодности амплитуды модулированной структуры в качестве параметра порядка нами исследовались системы кубической формы с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L = 30-64$ (эффективное чис-

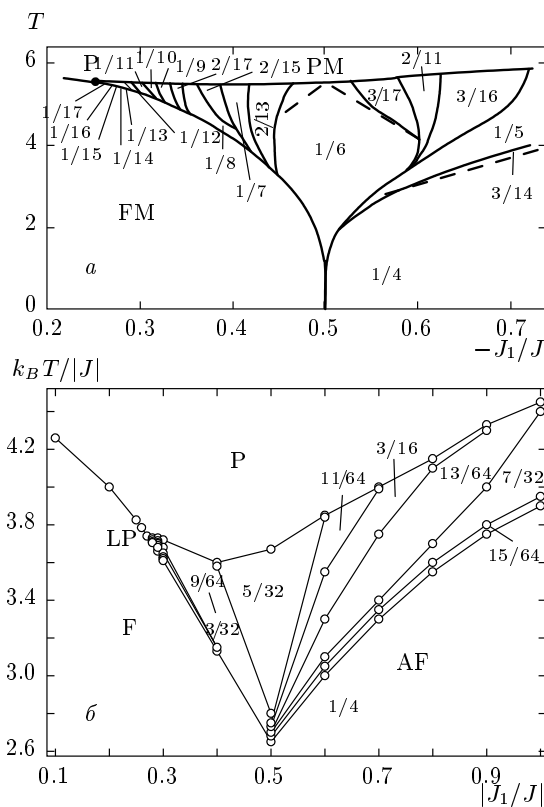


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями а) по данным [8], б) по результатам [5]; LP — точка Лифшица; F, P, AF — соответственно, ферромагнитная, парамагнитная и антиферромагнитная фазы, дробные числа указывают значения волновых чисел модулированной фазы

ло спинов $N = 27000-262144$). Расчеты проводились вдоль марковской цепи длиной $\tau = 100\tau_0$ ($\tau_0 = 10^5$ МК-шагов/спин — неравновесный участок цепи, который отбрасывается). Для изучения модулированной области мы рассчитывали величину

$$M_z = \frac{1}{N_z} \sum_{i=1}^{N_z} S_i, \tag{2}$$

представляющую собой усредненную намагниченность слоя, перпендикулярного оси z ($N_z = L_x \times L_y$, L_x, L_y — линейные размеры системы соответственно вдоль осей x и y , $z = 1, 2, \dots, L_z$).

На рис. 3 представлены модулированные структуры, возникающие в анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями для $|J_1/J| = 0.7$ при различных температурах.

Как видно на рисунке, в первом приближении

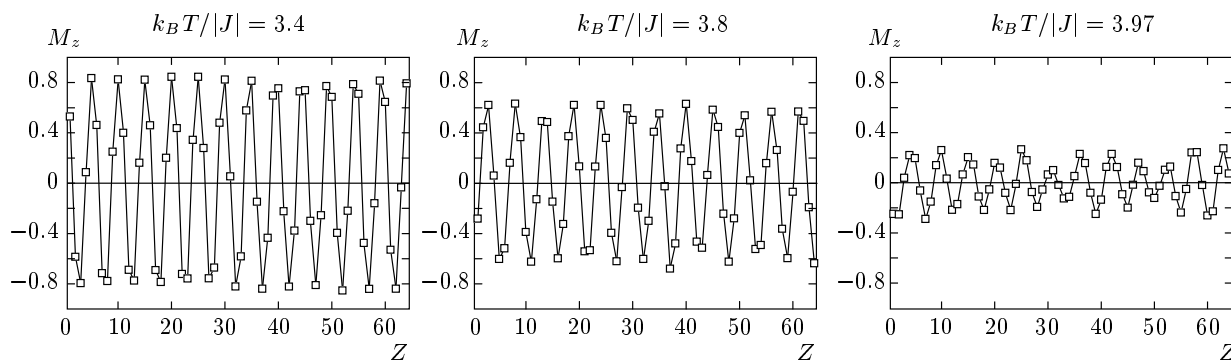


Рис. 3. Модулированные структуры ANNNI-модели для $|J_1/J| = 0.7$

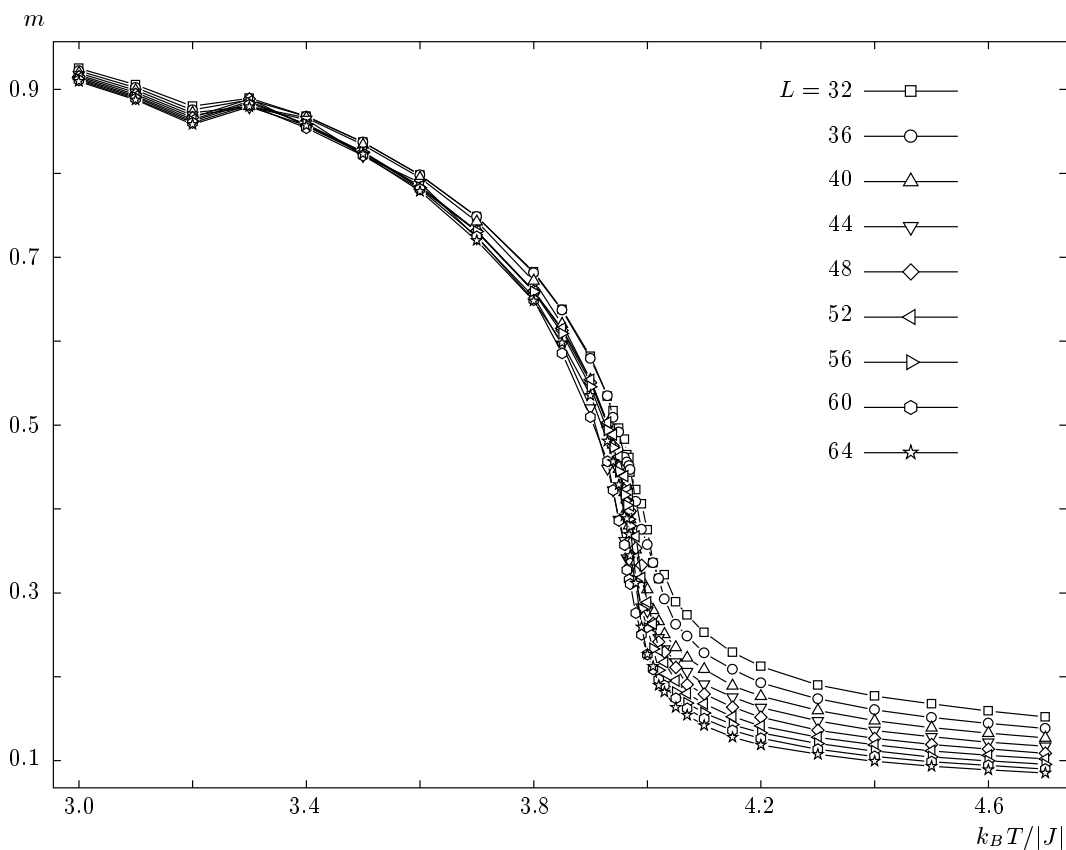


Рис. 4. Зависимость параметра порядка от температуры при $|J_1/J| = 0.7$

эти структуры можно описать с помощью гармонических функций синуса или косинуса:

$$M_z = A \cos(2\pi k z + \varphi), \tag{3}$$

где A — амплитуда, k — волновое число и φ — начальная фаза. Рисунок 3 демонстрирует, как в определенном интервале температур меняются амплитуды модулированной фазы A . При существенно более низких температурах значения амплитуд близки к

единице, а в области фазовых переходов имеют нулевые значения. Как следует из этих данных, наблюдается характерная для параметра порядка тенденция к уменьшению амплитуды от единицы до нуля с ростом температуры. Статистические флуктуации, возникающие в системе, приводят к тому, что амплитуда не имеет строго определенного значения для всей модулированной структуры, поэтому мы в качестве параметра порядка рекомендуем использовать величину

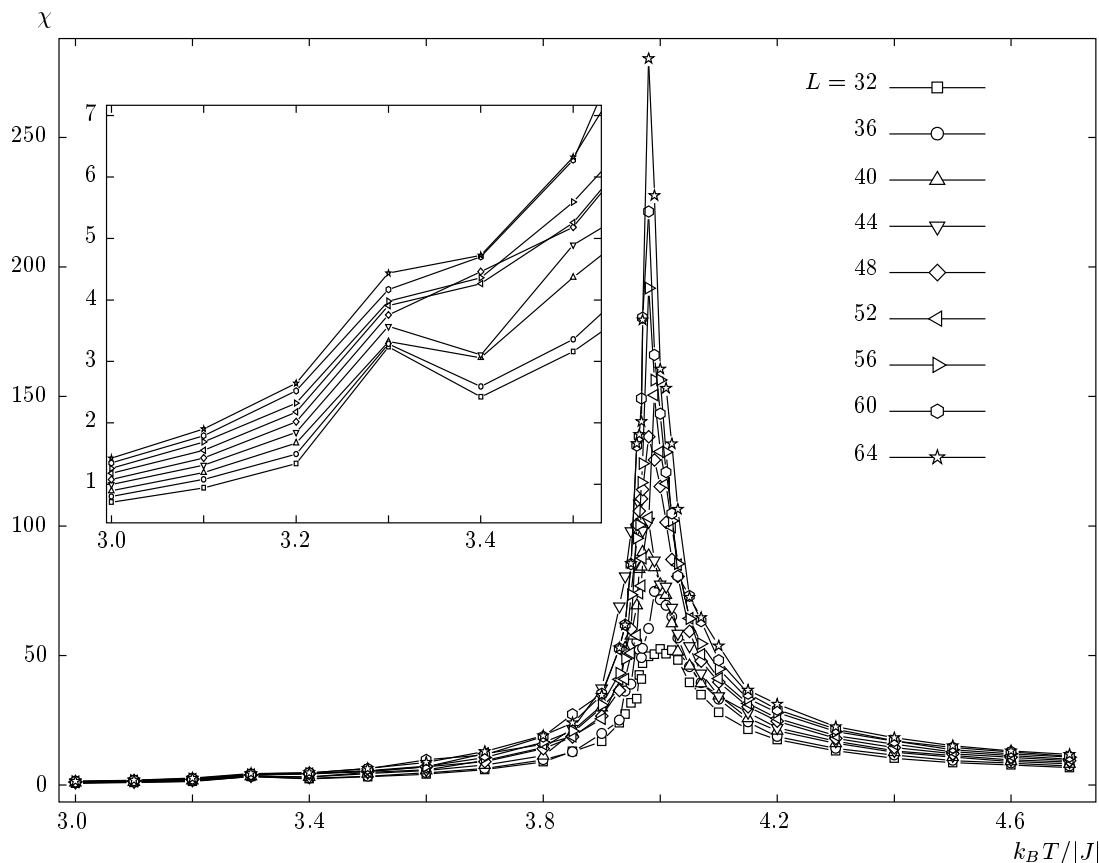


Рис. 5. Температурная зависимость восприимчивости при $|J_1/J| = 0.7$

$$m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |A_i|, \tag{4}$$

представляющую собой среднее значение максимальных и минимальных значений амплитуд A_i волновой структуры по всей длине образца, n — число полуволин, укладывающихся на длине образца.

Температурные зависимости выбранных таким образом параметров порядка m для систем с разными линейными размерами L представлены на рис. 4. Общий вид этих кривых очень близок к характерному для магнитных систем виду температурной зависимости суммарной намагниченности системы (подрешеточной намагниченности). Высокотемпературные «хвосты» параметра порядка, обусловленные конечными размерами изучаемых систем, уменьшаются с ростом L и характерны для такого рода исследований. Обращает на себя внимание небольшой минимум на зависимости m от T в окрестности температуры $T \approx 3.2$. Очевидно, что это связано с близостью к температуре фазового перехода из антиферромагнитной фазы (рис. 4) в мо-

дулированную. Для того чтобы проверить, насколько хорошо используемый параметр порядка m подходит для расчета других термодинамических параметров, нами были рассчитаны значения восприимчивости и кумулянты Биндера четвертого порядка.

Для вычисления восприимчивости использовалась формула [10]

$$\chi = (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \tag{5}$$

где $K = |J|/k_B T$. Температурные зависимости восприимчивости, представленные на рис. 5, демонстрируют хорошо выраженные максимумы в области температуры фазового перехода $T \approx 3.976(3)$ из модулированной в разупорядоченную фазу. Отметим, что максимумы восприимчивости для систем с достаточно большими линейными размерами, $L > 40$, приходятся на одну и ту же температуру и эта температура совпадает со значением, на которое приходится максимальная крутизна падения m на рис. 4.

Особенность, связанная с фазовым переходом из антиферромагнитной в модулированную фазу, на зависимости восприимчивости от температуры прояв-

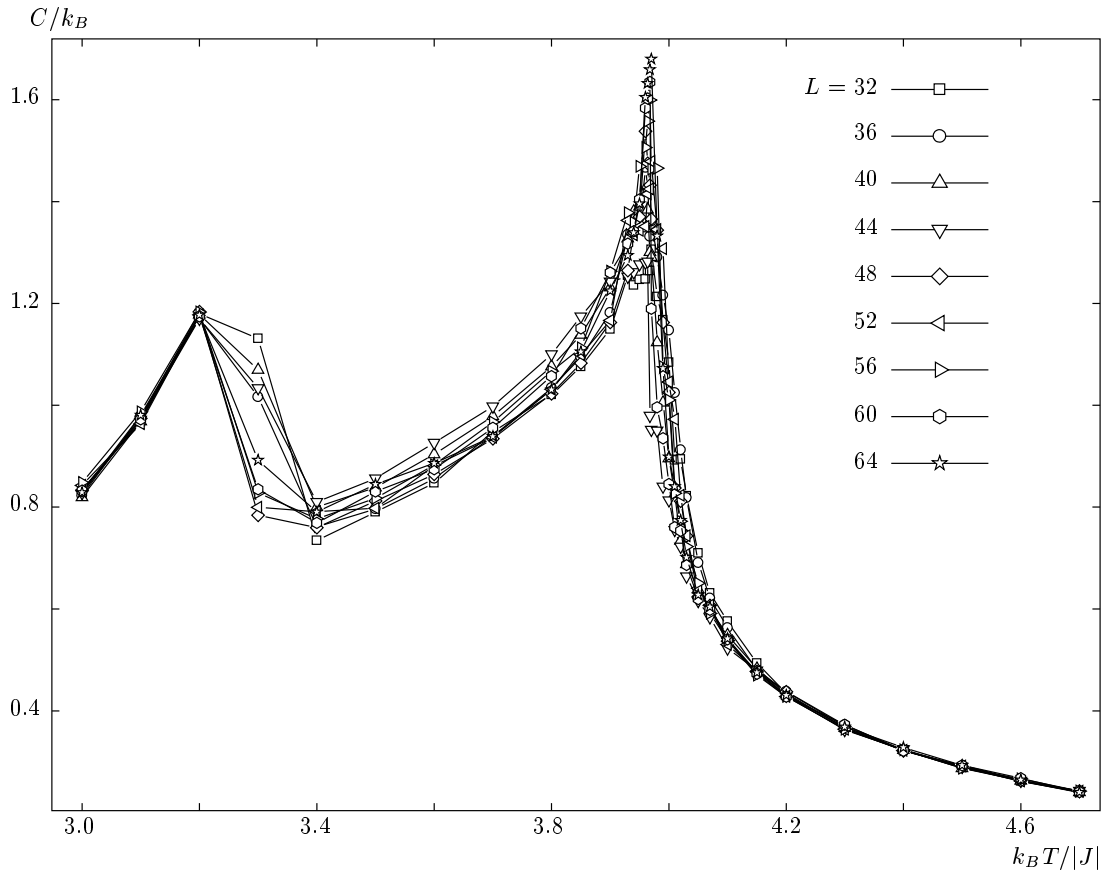


Рис. 6. Зависимость теплоемкости от температуры при $|J_1/J| = 0.7$

ляется очень слабо (см. вставку на рис. 5). Для полноты картины на рис. 6 представлена температурная зависимость теплоемкости C , вычисленной по формуле [10]:

$$C = NK^2 (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (6)$$

где U — внутренняя энергия. Здесь мы наблюдаем хорошо выраженный максимум в области температуры фазового перехода из модулированной фазы в разупорядоченную. Эти максимумы на температурной шкале в пределах погрешности совпадают со значениями максимумов восприимчивости (рис. 5) и максимумом убывания параметра m (рис. 4). Обращает на себя внимание второй максимум на температурной зависимости теплоемкости. Этот максимум значительно более четко выражен, чем на рис. 5, хотя и несколько смещен в сторону более низких значений.

Ход зависимости теплоемкости, восприимчивости и параметра порядка от температуры характерен для фазовых переходов второго рода.

Для определения особенностей фазового перехода из модулированной фазы в разупорядоченную и более точного определения критической температуры использовался метод кумулянтов Биндера [11, 12] (рис. 7):

$$U_k = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2, \quad (7)$$

$$U_L = 1 - \langle U^4 \rangle / 3 \langle U^2 \rangle^2. \quad (8)$$

Известно, что для фазовых переходов первого рода усредненная величина U_L стремится к некоторому нетривиальному значению U^* согласно выражению [13]

$$U_L = U^* + bL^{-d} \quad (9)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c$, где величина U^* отлична от $2/3$, а минимальная величина U_{min} расходится при $L \rightarrow \infty$. В случае фазового перехода второго рода кривые температурной зависимости U_k имеют четко выраженную точку пересечения, а усредненная величина U_L стремится к некоторому нетривиальному значению $U^* \rightarrow 2/3$ при $L \rightarrow \infty$ (рис. 7). Ап-

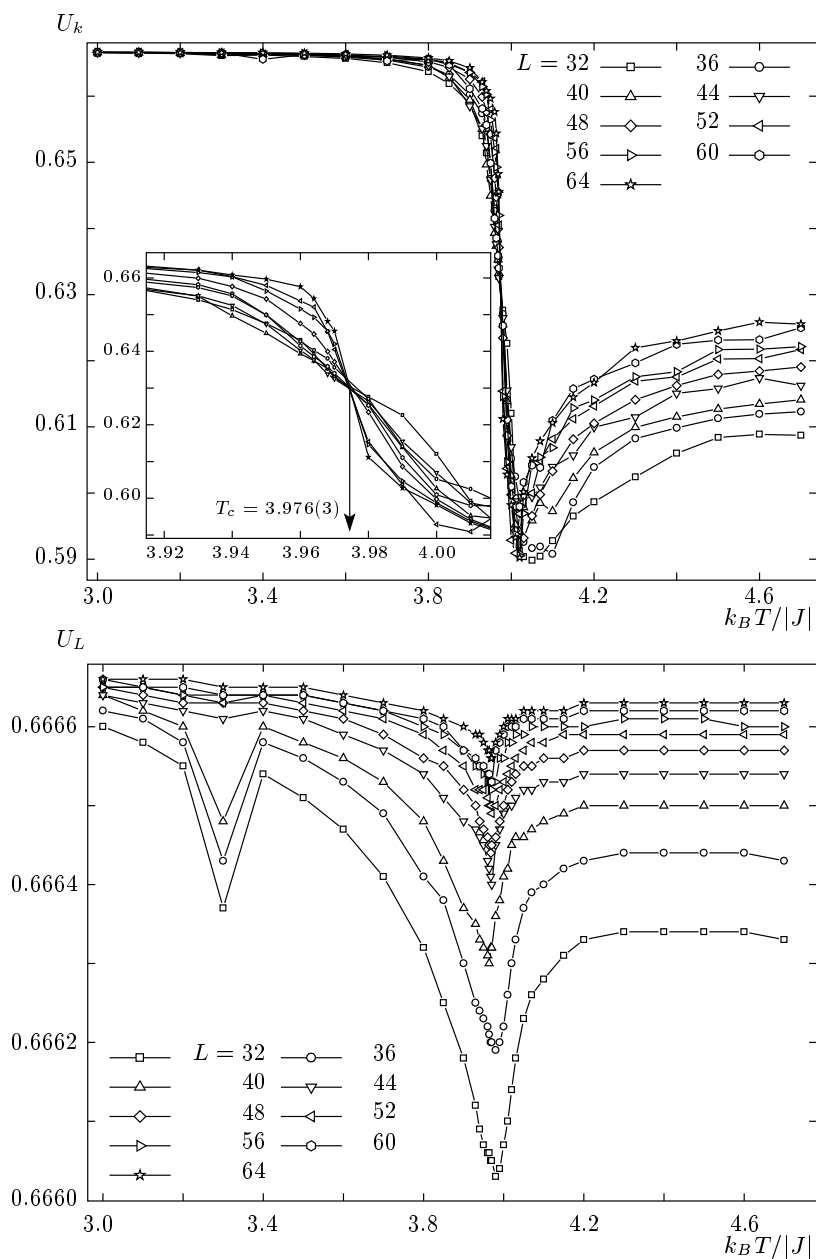


Рис. 7. Температурная зависимость кумулянтов Биндера при $|J_1/J| = 0.7$

проксимация, проведенная по формуле (9), показана на рис. 8. Такое поведение кумулянтов Биндера показывает, что фазовый переход из модулированного состояния в разупорядоченное является переходом второго рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, можно утверждать, что при исследовании фазовых переходов методами Мон-

те-Карло существенную роль играет выбор параметра порядка. И его выбор определяется природой магнитного упорядочения. В нашем случае при исследовании модулированных структур в качестве параметра порядка предлагается амплитуда модулированной фазы. Как показывают приведенные выше результаты, такой выбор параметра порядка позволяет изучать критическое поведение системы при фазовом переходе модулированная фаза–парамагнетик.

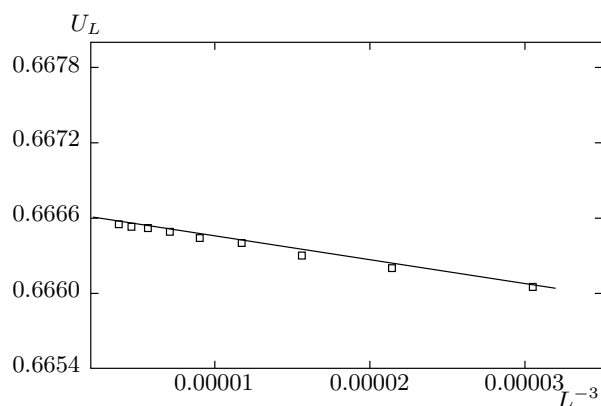


Рис. 8. Зависимость кумулянта Биндера U_L от L

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 12-02-96504, 10-02-00130, 12-02-31428) и в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (Госконтракты №№ П559, 02.270.11.03.97), «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России» на 2007–2013 гг. (Госконтракт № 16.552.11.7051).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Изюмов, В. М. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва (1984).
2. K. Zhang and P. Charbonneau, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 195703 (2010).
3. М. А. Анисимов, Е. Е. Городецкий, В. М. Запрудский, *УФН* **133**, 103 (1981).
4. R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **124**, 346 (1961).
5. А. К. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, *ФНТ* **35**, 1011 (2009).
6. А. К. Murtazaev and J. G. Ibaev, *Sol. St. Comm.* **152**, 177 (2012).
7. А. К. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, *ЖЭТФ* **140**, 123 (2011).
8. N. Metropolis, A. W. Rosebluth, M. N. Rosebluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
9. W. Selke, *Phys. Rep.* **170**, 213 (1988).
10. P. Peszak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
11. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
12. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, *ЖЭТФ* **136**, 516 (2009).
13. D. Loison and K. D. Schote, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).