

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

А. К. Муртазаев^{a,b}, М. К. Рамазанов^{a,c}, Ф. А. Кассан-Оглы^d, М. К. Бадиев^{a*}

^a Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Республика Дагестан, Россия

^b Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Республика Дагестан, Россия

^c Дагестанский государственный педагогический университет
367003, Махачкала, Республика Дагестан, Россия

^d Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 17 июня 2013 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло и гистограммного анализа данных изучены фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей в диапазоне значений $0.1 \leq r < 1$. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Обнаружено, что в рассмотренном интервале в исследуемой модели наблюдается фазовый переход второго рода.

DOI: 10.7868/S0044451013120122

1. ВВЕДЕНИЕ

При количественном описании фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в современной физике конденсированного состояния используются различные решеточные модели. С помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удалось точно решить лишь очень ограниченное количество задач. Одной из таких моделей является двумерная модель Изинга, которая со взаимодействиями ближайших соседей хорошо исследована различными методами и в рамках разных подходов [1–4]. Та же модель на квадратной решетке с ферромагнитными взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей тоже была точно решена. Однако учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической двумерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз

и фазовых переходов, кроме того, учет взаимодействия следующих ближайших соседей может также влиять на критическое поведение модели, в частности появляются различные аномалии критических свойств [5].

В конце 1970-х гг. первые ренормгрупповые расчеты и численное моделирование методом Монте-Карло для двумерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке со взаимодействиями вторых ближайших соседей были проведены в работах [6, 7]. Авторы этих работ предположили, что в этой модели происходит фазовый переход второго рода, вычислили температуру фазового перехода и рассчитали критические индексы.

В работах [8–12] также показано, что в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке со взаимодействиями следующих ближайших соседей имеет место ФП второго рода. И эта модель может обладать «аномальными» критическими индексами. Кроме того, обнаружена зависимость критических индексов от соотношения $r = J_2/J_1$, где J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия со-

*E-mail: m_zagir@mail.ru

ответственно ближайших и следующих ближайших соседей. Но все же сценарий непрерывного фазового перехода оставался под вопросом после расчетов с помощью теории среднего поля, которые показали наличие фазового перехода первого рода [13].

Согласно результатам работ [14–16], для модели Изинга на квадратной решетке с ферромагнитными взаимодействиями ближайших соседей и антиферромагнитными взаимодействиями вторых ближайших соседей в диапазоне значений $r = 0.5–1.2$ в системе также наблюдается ФП первого рода.

В работе [17] нами были проведены исследования для антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей для $r = 1$. Было показано, что в этой модели имеет место ФП второго рода.

В настоящей работе мы предприняли попытку по возможности с максимальной точностью с соблюдением единой методики и с использованием надежной и проверенной схемы на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло определить род ФП антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей в интервале значений $0.1 \leq r < 1$.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Антиферромагнитная модель Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом [17]:

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

где $S = \pm 1$ — изинговский спин. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей ($J_1 < 0$), а второй — следующих ближайших соседей ($J_2 < 0$). В отсутствие магнитного поля основное состояние для ферромагнитной ($J_1 > 0$) и антиферромагнитной ($J_1 < 0$) моделей эквивалентно. Рассмотрим только антиферромагнитный случай. В этой модели при учете антиферромагнитных взаимодействий следующих ближайших соседей возникают эффекты фрустрации.

Исследование фазовых переходов фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом трудно преодолимых проблем. Это связано с тем, что для таких моделей характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Строго и последователь-

но на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами Монте-Карло [18–21], но обычные методы Монте-Карло плохо справляются с решением этих проблем. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, которые позволяют преодолеть эти проблемы. Наиболее мощными и эффективными в исследовании ФП и КЯ в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК [22]. Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде.

1. Одновременно моделируются две реплики X и X' с разными температурами T и T' .

2. После выполнения 100 шагов Монте-Карло на спин эти реплики обмениваются данными в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X \rightarrow X') = \begin{cases} 1, & \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \Delta > 0, \end{cases}$$

где $\Delta = (U - U')(1/T - 1/T')$, U и U' — внутренняя энергия соответственно первой и второй реплики.

Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности очень утомительно и отнимает много времени.

К настоящему моменту репличные алгоритмы метода Монте-Карло и теория конечно-размерного скейлинга стали основными инструментами исследования критических свойств столь сложных систем.

Для анализа характера фазовых переходов и особенностей тепловых характеристик вблизи критической точки весьма эффективным и информативным является гистограммный метод анализа данных [23]. Гистограммный анализ данных позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом Монте-Карло на основе расчета кумулянтов Биндера, но и определить ряд других важных параметров [24].

Гистограммный метод использует случайное блуждание в энергетическом пространстве и позволяет получить точные оценки для плотности состояний энергии $g(U)$. Вероятность перехода из одного состояния в другое определяется формулой

$$P(U \rightarrow U') = \min [g(U)/g(U'), 1], \quad (2)$$

где U и U' — энергии до и после переворота спина.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20–150$. Соотношение обменного взаимодействия вторых и ближайших соседей менялось в интервале $0.1 \leq r < 1$. Для вывода системы в

состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 100\tau_0$ шагов Монте-Карло на спин.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использованы выражения [25]

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

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

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка.

Параметр порядка системы m вычислялся с помощью выражений [26]

$$m_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} S_i, \quad \lambda = 1, 2, 3, 4, \quad (5)$$

$$m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)] / 4, \quad (6)$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)] / 4, \quad (7)$$

$$m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2}, \quad (8)$$

где m_1, m_2, m_3, m_4 — параметр порядка по подрешеткам.

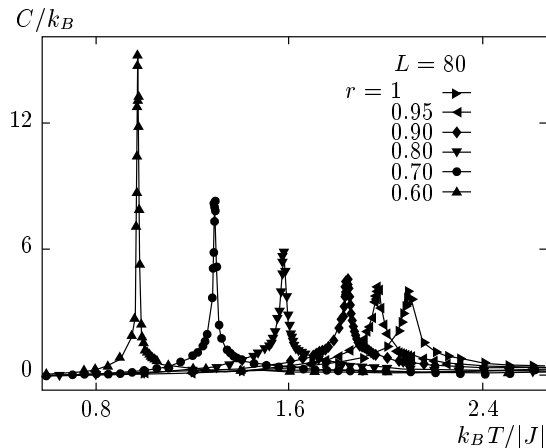


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для различных r

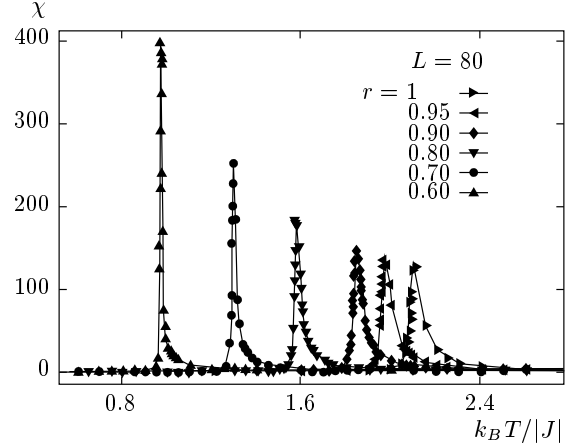


Рис. 2. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J|$ для различных r

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости, полученные при $L = 80$ для различных значений r (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Отметим, что уменьшение значения r в интервале $1 \geq r \geq 0.6$ сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов как теплоемкости, так и восприимчивости. Физическую картину происходящего можно объяснить следующим образом. С увеличением взаимодействия вторых ближайших соседей увеличивается вклад энергии взаимодействия по модулю, что укрепляет жесткость системы и, соответственно, повышает температуру фазового перехода. Рост абсолютных значений максимумов происходит за счет конкуренции первых и вторых ближайших соседей.

На рис. 3 и 4 приведены графики зависимости теплоемкости и восприимчивости от температуры в интервале $0.1 \leq r \leq 0.4$. Отметим, что на всех графиках теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для всех r вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы. В случае, когда $0.1 \leq r \leq 0.4$, наблюдаем противоположную картину. С уменьшением r от 0.4 до 0.1 температура фазового перехода смещается в сторону более высоких температур.

Для определения критических температур T_N мы использовали метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка, который имеет вид [27]

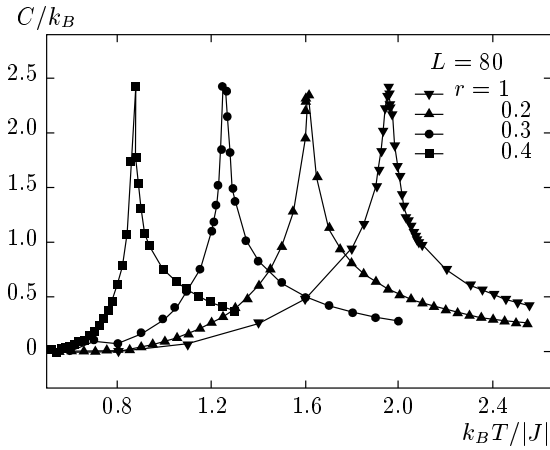


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для различных r

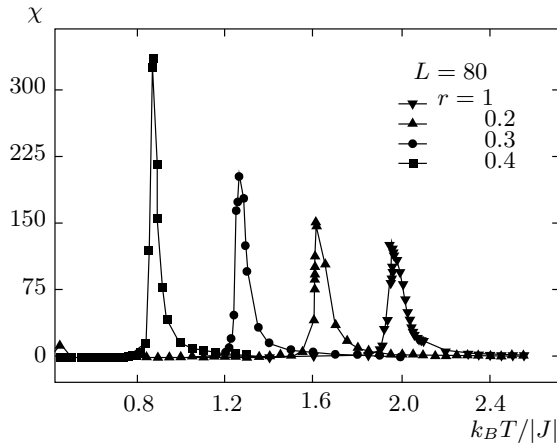


Рис. 4. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J|$ для различных r

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (9)$$

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \quad (10)$$

где U_L — кумулянт по намагниченности, V_L — кумулянт по энергии.

Выражения (8) и (9) позволяют определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера дает возможность также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [28].

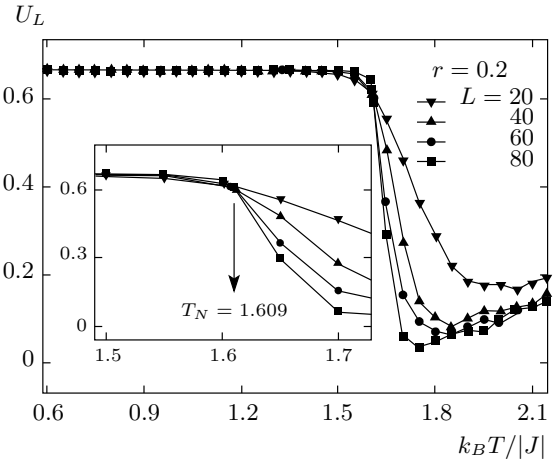


Рис. 5. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J|$ для $r = 0.2$ при различных L

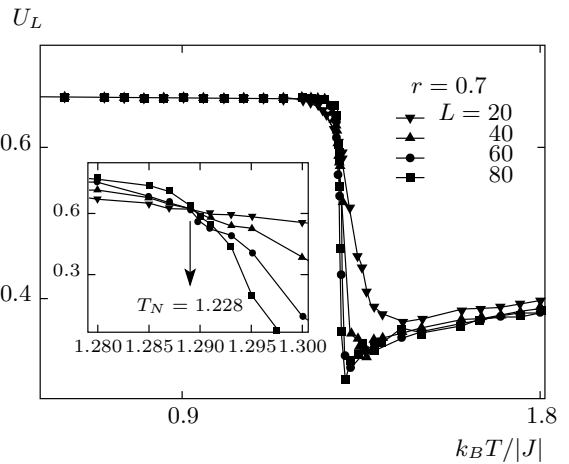


Рис. 6. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J|$ для $r = 0.7$ при различных L

На рис. 5 и 6 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $r = 0.2$ и $r = 0.7$ для разных значений L . Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. На вставках видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r . На рис. 7 и 8 показаны температурные зависимости кумулянтов по энергии V_L при $r = 0.2$ и $r = 0.7$ для разных L . На рисунках видно, что при увеличении L минимум величины V_L исчезает, а значение V_L при $T \rightarrow 0$ стре-

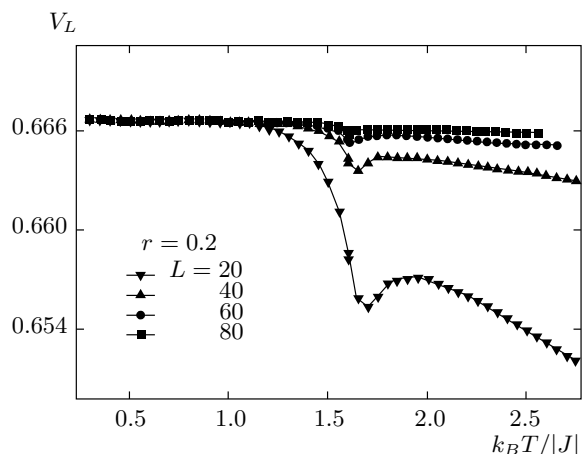


Рис. 7. Зависимости кумулянта Биндера V_L от температуры $k_B T / |J|$ для $r = 0.2$ при различных L

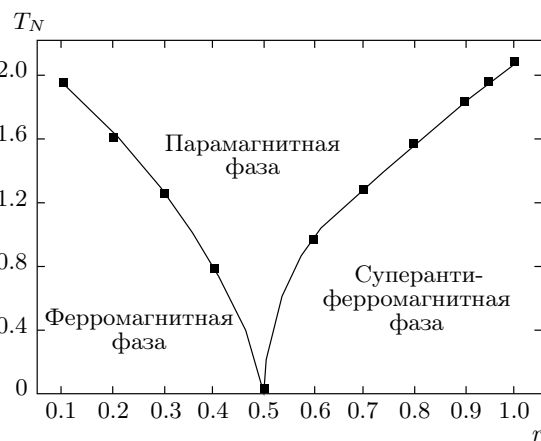


Рис. 9. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей

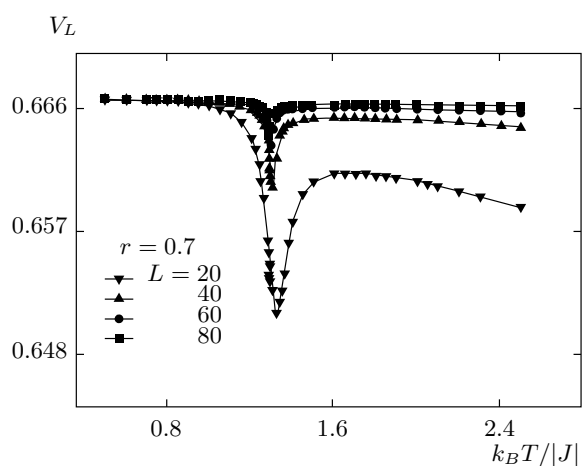


Рис. 8. Зависимости кумулянта Биндера V_L от температуры $k_B T / |J|$ для $r = 0.7$ при различных L

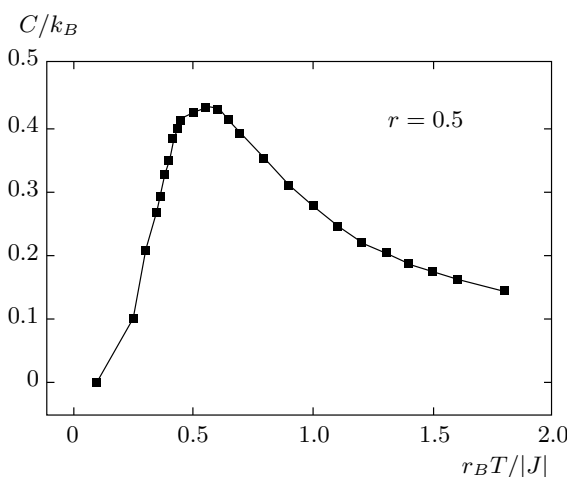


Рис. 10. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J|$ для $r = 0.5$ при $L = 150$

мится к $2/3$, что также характерно для ФП второго рода.

На рис. 9 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. На этой диаграмме видно, что для значения $r = 0.5$ критическая температура $T_N = 0$ и фазовый переход отсутствует. Это объясняется тем, что для рассмотренной нами модели при $r = 0.5$ взаимодействия первых и вторых ближайших соседей одинаковые и в системе возникает полная фрустрация. Это нарушает порядок в системе и приводит к исчезновению фазового перехода. Об этом мы также можем судить по рис. 10, где температурная зависимость теплоемкости не испытывает резкого скачка, а меняется

плавно. На диаграмме (рис. 9) мы видим, что в точке $r = 0.5$ пересекаются три различные фазы: ферромагнитная, парамагнитная и суперантиферромагнитная.

Такая же модель была исследована и в работе [29]. Авторы построили фазовую диаграмму зависимости температуры фазового перехода T_N от отношения обменных параметров r . Они обнаружили, что в интервале значений $r < 0.5$ и $r \geq 0.948$ происходит фазовый переход второго рода, а в интервале $0.5 < r < 0.948$ наблюдают переход первого рода. Результаты наших исследований показали, что в области $0.5 < r \leq 1$ наблюдается фазовый переход второго рода. Этот факт нами подтверждается и гистограммным анализом данных.

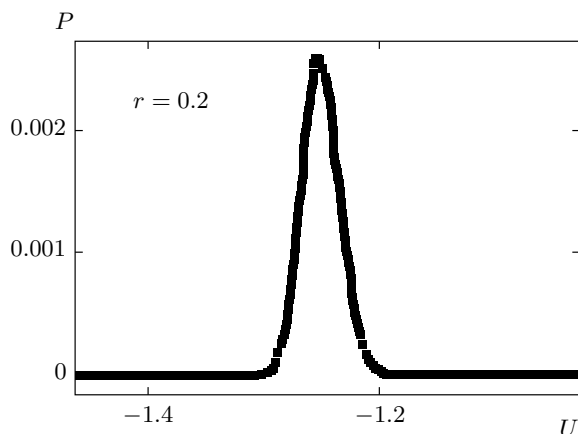


Рис. 11. Гистограмма распределения энергии для случая $r = 0.2$

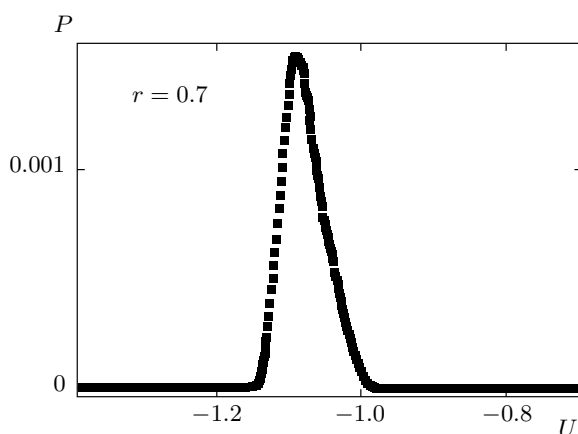


Рис. 12. Гистограмма распределения энергии для случая $r = 0.7$

На рис. 11 и 12 приведены гистограммы распределения энергии для случаев $r = 0.2$ и $r = 0.7$. Графики построены вблизи критической точки для размеров решетки $L = 150$. На рисунках мы наблюдаем один пик, что характерно для фазовых переходов второго рода [27]. Аналогичные гистограммы были построены и для остальных значений r . Из полученных результатов следует, что во всем рассмотренном нами интервале значений $0.1 \leq r \leq 1$ наблюдаются фазовые переходы второго рода, кроме случая $r = 0.5$, где ФП отсутствует. Установлено, что точка $r = 0.5$ является точкой фрустрации.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов в двумерной антиферромагнитной модели Изинга с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов для различных соотношений величины взаимодействия r первых и вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что для всех значений из интервала $0.1 \leq r < 1$ наблюдается фазовый переход второго рода, кроме точки $r = 0.5$. При $r = 0.5$ система становится полностью фрустрированной и требует специальных исследований.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации по ФЦП (соглашение 14.В37.21.1092 «Разработка и исследование моделей перспективных наноструктур методами компьютерного моделирования»), РФФИ (гранты №№ 12-02-96504-р_юг_а, 13-02-00220) и в рамках проекта интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН № 12_И_2_2020.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. N. Barber, *J. Phys. A* **12**, 679 (1979).
2. D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev. B* **31**, 5946 (1985).
3. J. A. Plascak, *Physica A* **183**, 563 (1992).
4. E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
5. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).
6. M. P. Nightingale, *Phys. Lett. A* **59**, 486 (1977).
7. J. Oitmaa, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14**, 1159 (1981).
8. M. P. Nightingale, *Phys. Lett. A* **59**, 468 (1977).
9. R. H. Swendsen and S. Krinsky, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 177 (1979).
10. K. Binder and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **21**, 1941 (1980).
11. D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev. B* **31**, 5946 (1985).

12. K. Minami and M. Suzuki, J. Phys. A **27**, 7301 (1994).
13. J. L. Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja, and J. M. Sanchez, Phys. Rev. B **48**, 3519 (1993).
14. J. L. Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja, and J. M. Sanchez, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 9759 (1994).
15. E. Lopez-Sandoval, J. L. Moran-Lopez, and F. Aguilera-Granja, Sol. St. Comm. **112**, 437 (1999).
16. C. Buzano and M. Pretti, Phys. Rev. B **56**, 636 (1997).
17. A. K. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **37**, 1258 (2011).
18. A. K. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
19. A. K. Murtazaev and M. K. Ramazanov, Phys. Rev. B **76**, 174421 (2007).
20. A. K. Муртазаев, И. К. Камиллов, М. К. Рамазанов, ФНТ **32**, 323 (2006).
21. A. K. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **35**, 663 (2009).
22. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
23. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2015 (2001).
24. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).
25. K. Binder and J.-Sh. Wang, J. Stat. Phys. **55**, 87 (1989).
26. Junqi Yin and D. P. Landau, arXiv:0909.4000v1.
27. A. K. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **142**, 338 (2012).
28. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
29. A. R. Anjos, J. R. Viana, and J. R. Sousa, Phys. Lett. A **372**, 1180 (2008).