

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Критическое поведение антиферромагнитной модели Изинга с эффектами дальнего действияС. В. Белим,^a И. Б. Ларионов*Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского.
Россия, 644077, Омск, пр. Мира, д. 55а.*

Статья поступила 27.07.2017, подписана в печать 29.08.2017.

В статье проведено моделирование методом Монте-Карло антиферромагнитной модели Изинга с ферромагнитным дальним действием. Рассмотрен случай ферромагнитных дальнедействующих сил, убывающих по степенному закону. Получена зависимость температуры фазового перехода от значений параметров дальнего действия. Построена фазовая диаграмма при различных значениях параметров дальнего действия. Выявлены условия существования фрустрированного состояния системы.

Ключевые слова: критические явления, антиферромагнитная модель Изинга, эффекты дальнего действия.
УДК: 538.9. PACS: 68.35.Rh.

ВВЕДЕНИЕ

Описание критического поведения антиферромагнитных систем опирается на модель Изинга с отрицательным обменным интегралом и учитывает только взаимодействие ближайших спинов. Режим критического поведения определяется набором критических индексов, характеризующих поведение термодинамических функций. Однако в ряде экспериментов [1, 2, 4, 5] наблюдалось критическое поведение, отличное от модели Изинга ($\gamma = 1.241$, $\beta = 0.325$). Данные отклонения объясняются необходимостью учета взаимодействия не только между ближайшими спинами, но и между спинами, следующими за ближайшими.

Традиционная модель Изинга основывается на предположении, что обменное взаимодействие убывает с расстоянием по экспоненциальному закону. В силу быстрого убывания величины взаимодействия обменными силами, создаваемыми соседями, следующими за ближайшими, можно пренебречь как малой величиной. Однако экспериментальное измерение скорости убывания взаимодействия между спинами с расстоянием в некоторых материалах показало, что данное предположение может не выполняться. Так, в работе [2] для антиферромагнетика EuO величина обменного интеграла для соседей, следующих за ближайшими, равна $J_2 = (0.5 \pm 0.2)J_1$ (J_1 — обменный интеграл для ближайших соседей) и, как следствие, критические индексы ($\gamma = 1.29 \pm 0.01$, $\beta = 0.368 \pm 0.005$) отличаются от характерных для трехмерной модели Изинга. Для описания дальнедействующих сил в гамильтониане системы необходимо учесть взаимодействие, убывающее с расстоянием по степенному закону

$$J(r) \sim r^{-D-\sigma},$$

где D — размерность системы, σ — параметр дальнего действия [6].

Критическое поведение трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с учетом спинов, следующих за ближайшими, на кубической решетке было исследовано с помощью репличного алгоритма методом Монте-Карло и гистограммного анализа данных в статье [7]. В работе построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей в трехмерных системах. В статье показано, что для всех значений интенсивности взаимодействия вторых ближайших соседей реализуется фазовый переход второго рода. Определено значение отношения констант близкоддействия и дальнедействия, при котором температура Нееля имеет минимальное значение.

Исследование критического поведения различных систем с учетом взаимодействия между спинами, убывающего с расстоянием по степенному закону в рамках теоретико-полевого подхода, было проведено в статьях [8–13]. Результаты ϵ -разложения [8, 9] и дальнейшие более точные расчеты непосредственно в трехмерном пространстве [10–13] показали, что режим критического поведения существенно зависит от скорости убывания взаимодействия с расстоянием.

1. ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга с эффектами дальнего действия может быть записан в следующем виде:

$$H = -J \sum S_i S_j + \frac{bJ}{r^{D+\sigma}} \sum S_i S_k.$$

Здесь S_i — значение спина в i -м узле ($+1/2$ или $-1/2$), J — значение обменного интеграла, b — интенсивность дальнего действия, показывающая относительный вклад

^a E-mail: sbelim@mail.ru

эффектов дальнего действия по сравнению с ближкодействием, σ — параметр дальнего действия, показывающий скорость убывания дальнедействующих сил с расстоянием, D — размерность системы, в дальнейшем все расчеты проводились при $D = 3$. В первом слагаемом суммирование осуществляется только по ближайшим соседям, во втором слагаемом, кроме ближайших соседей, учитываются также спины, расположенные внутри сферы радиуса $2a$, где a — постоянная решетки.

Из вида гамильтониана можно сделать вывод, что при $b > a^{D+\sigma}$ уже на уровне ближайших соседей ферромагнитное упорядочивание будет доминировать над антиферромагнитным. Реальное значение параметра b , при котором происходит смена антиферромагнитного упорядочивания ферромагнитным, будет иметь меньшее значение, вследствие влияния соседей, следующих за ближайшими. Таким образом, на фазовой диаграмме вещества будет присутствовать три фазы: неупорядоченная, антиферромагнитная и ферромагнитная. Данные фазы будут разделены двумя линиями фазовых переходов, пересекающихся в некоторой точке. Из этой же точки будет выходить линия, на которой будет наблюдаться фрустрированное состояние вещества. На линии фрустраций вследствие конкуренции между ферромагнитным и антиферромагнитным упорядочиванием будет отсутствовать устойчивое состояние системы. Условием фрустрированного состояния является равенство антиферромагнитного слагаемого ближкодействия и ферромагнитного слагаемого дальнего действия. В связи с этим необходимо вводить два параметра порядка, отвечающих за различные виды упорядочивания. Обозначим через m_1 магнитный момент системы, вычисляемый как сумма значений спинов в единице объема. Для антиферромагнитного параметра порядка введем обозначение m_2 и будем вычислять его как шахматную намагниченность.

Критическое поведение системы моделировалось на основе алгоритма Метрополиса. Изучались системы с простой кубической решеткой с размерами $L \times L \times L$ и периодическими граничными условиями. Для определения температуры фазового перехода использовались кумулянты Биндера четвертого порядка [14]:

$$U_1 = 1 - \frac{\langle m_1^4 \rangle}{3\langle m_1^2 \rangle^2}, \quad U_2 = 1 - \frac{\langle m_2^4 \rangle}{3\langle m_2^2 \rangle^2}.$$

Угловыми скобками обозначено усреднение по различным конфигурациям, m_1 — магнитный момент системы, m_2 — шахматная намагниченность системы. В работе [14], в рамках теории конечномерного скейлинга, показано, что кумулянты Биндера для систем разного размера пересекаются в точке, соответствующей критической температуре.

Для системы исследовались намагниченность системы $M_1 = \langle m_1 \rangle / N$ и шахматная намагниченность $M_2 = \langle m_2 \rangle / N$. $N = L^3$ — количество спинов.

Также в рамках компьютерного эксперимента исследовалась восприимчивость каждого из параметров

порядка

$$\chi_1 = NK(\langle m_1^2 \rangle - \langle m_1 \rangle^2), \quad \chi_2 = NK(\langle m_2^2 \rangle - \langle m_2 \rangle^2),$$

где $K = |J|/(k_B T)$, k_B — постоянная Больцмана.

Определение критических индексов основывается на теории конечномерного скейлинга [14]. Восприимчивости в критической области удовлетворяют соотношению

$$\chi_1 \sim L^{\gamma_1/\nu_1}, \quad \chi_2 \sim L^{\gamma_2/\nu_2}.$$

Из данного соотношения может быть найдено отношение критических индексов γ_1/ν_1 и γ_2/ν_2 . Критические индексы ν_1 и ν_2 могут быть вычислены из соотношений

$$\frac{dU_i}{dT} \sim L^{-1/\nu_i}, \quad i = 1, 2.$$

Остальные критические индексы могут быть определены из скейлинговых соотношений

$$\eta_i = \sigma - \frac{\gamma_i}{\nu_i}, \quad \beta_i = \frac{\nu_i}{2}(D - \sigma + \eta_i), \\ \alpha_i = \sigma - D\nu_i, \quad i = 1, 2.$$

Компьютерный эксперимент проводился для систем размером от $L = 20$ до $L = 60$ с шагом $\Delta L = 10$, количество шагов Монте-Карло на спин было равно $3 \cdot 10^5$. Как показали расчеты, системы с линейным размером, определяемым четным числом, приходят в состояние равновесия значительно быстрее, что обусловлено антиферромагнитным слагаемым в гамильтониане. Для исследования системы и построения фазовой диаграммы производилось варьирование двух параметров — b и σ . Значения параметра σ менялись от 1.5 до 2.0 с шагом 0.1. Значения параметра b изменялись в интервале от 0.5 до 1.4 с шагом 0.1. Расчеты производились на графическом процессоре с предварительным распараллеливанием алгоритма Метрополиса, что позволило до 445 вычислительных потоков. Распараллеливался процесс сбора статистических данных.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 представлена фазовая диаграмма системы для значений параметра $\sigma = 1.6$. Для других значений параметра σ общий вид фазовой диаграммы остается неизменным. Скорость убывания дальнего действия с расстоянием влияет только на угол наклона линий фазовых переходов. Как и ожидалось, на фазовой диаграмме присутствуют три фазы. Линии фазовых переходов и фрустрированного состояния являются прямыми.

Угол наклона прямых, разделяющих фазы, зависит от параметра σ как для ферромагнитного, так и для антиферромагнитного переходов. На рис. 2 и 3 представлены графики зависимости температуры Кюри и температуры Нееля от параметра b при различных значениях σ .

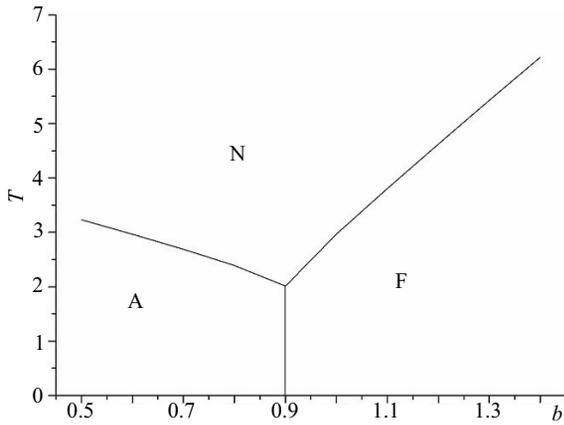


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы при $\sigma = 1.6$. N — неупорядоченная фаза, F — ферромагнитная фаза, A — антиферромагнитная фаза

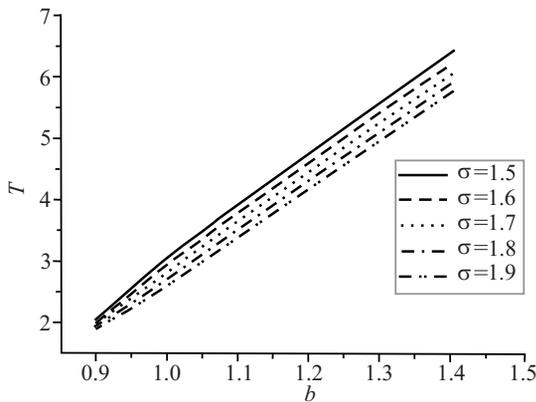


Рис. 2. Зависимость температуры Кюри от параметра b при различных значениях σ

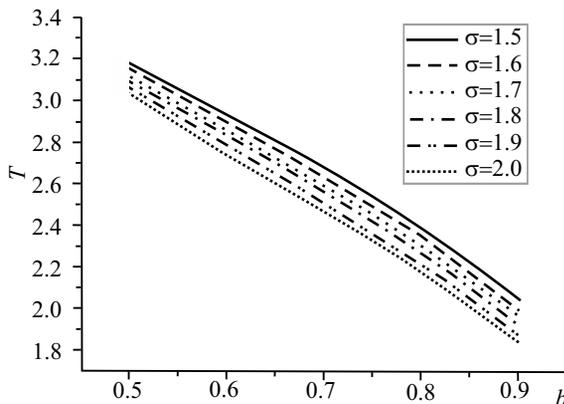


Рис. 3. Зависимость температуры Нееля от параметра b при различных значениях σ

Изменение показателя степени σ приводит к параллельному смещению линий фазовых переходов. При любом значении параметра дальнего действия σ линии фазовых переходов пересекаются при $b_f = 0.92$.

Зависимость температуры Кюри от параметров дальнего действия с хорошей точностью аппроксимиру-

ется выражением

$$T_C = (-2.02\sigma + 11.60)b + 1.07\sigma - 7.15.$$

Аналогичное выражение для температуры Нееля имеет вид

$$T_N = (-0.31\sigma - 2.51)b - 0.18\sigma + 5.05.$$

Значения критических индексов для ферромагнитного фазового перехода при $b = 0.6$ и различных значениях σ приведены в табл. 1. Аналогичные значения критических индексов для антиферромагнитной системы показаны в табл. 2.

Табл. 1. Значения критических индексов для ферромагнитного фазового перехода при $b = 1.6$

σ	γ	β
1.5	1.230 ± 0.001	0.336 ± 0.001
1.6	1.234 ± 0.002	0.337 ± 0.001
1.7	1.227 ± 0.001	0.337 ± 0.002
1.8	1.227 ± 0.001	0.333 ± 0.002
1.9	1.229 ± 0.001	0.334 ± 0.001
2.0	1.231 ± 0.002	0.336 ± 0.002

Табл. 2. Значения критических индексов для антиферромагнитного фазового перехода при $b = 0.6$

σ	γ	β
1.5	1.305 ± 0.001	0.328 ± 0.001
1.6	1.200 ± 0.001	0.299 ± 0.002
1.7	1.156 ± 0.001	0.291 ± 0.002
1.8	1.231 ± 0.003	0.317 ± 0.003
1.9	1.236 ± 0.002	0.321 ± 0.001
2.0	1.241 ± 0.001	0.326 ± 0.002

Как видно из табл. 1 и 2, наблюдается существенное отличие критического поведения систем вблизи ферромагнитного и антиферромагнитного фазовых переходов. Для антиферромагнитной фазы критические индексы находятся в хорошем согласии со значениями, полученными в рамках теоретико-полевого подхода для модели Изинга с эффектами дальнего действия [10, 11]. Для ферромагнитной фазы критические индексы практически не зависят от параметров дальнего действия и совпадают со значениями, характерными для обычной трехмерной модели Изинга.

Отдельно рассмотрим линию, разделяющую антиферромагнитную и ферромагнитную фазы, которая наблюдается при $b = b_f$. На рис. 4 показано поведение намагниченности M_1 и шахматной намагниченности M_2 при изменении параметра b при постоянной температуре. Как хорошо видно, при $b_f = 0.9$ значения намагниченностей равны. В этом случае наблюдается фрустрированное состояние, при котором в системе не может установиться какое-либо упорядочение. Следует отметить, что значение b_f не зависит от параметра σ .

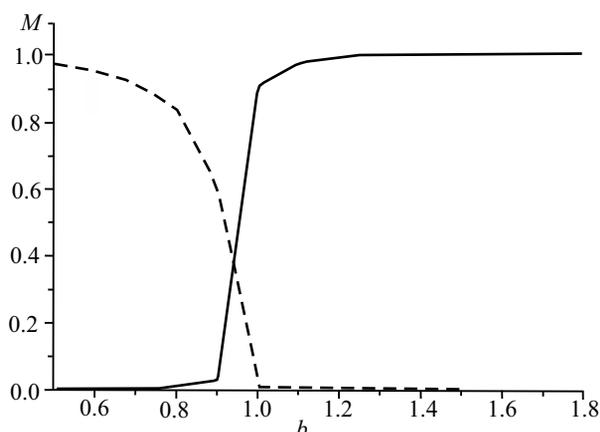


Рис. 4. Зависимость намагниченности и шахматной намагниченности от параметра дальнего действия b при $T = 1.8$ и $\sigma = 1.8$. Сплошной линией показано поведение намагниченности, пунктирной линией — шахматной намагниченности

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, влияние соседей, следующих за ближайшими, может приводить к существованию ферромагнитной фазы вместо антиферромагнитной для систем с отрицательным обменным интегралом между ближайшими соседями. Данный эффект был обнаружен в ряде веществ экспериментально. Так, конкуренция между близкодствующими антиферромагнитными силами и дальнедействующими ферромагнитными наблюдалась в соединениях MnX ($X = Bi, Sb, As, P$) [15–20]. В работах [15, 16] для $MnBi$ экспериментально показано, что обменный интеграл для взаимодействия ближайших соседей имеет отрицательное значение, тогда как обменные интегралы для всех соседей, следующих за ближайшими и следующих за ними, имеют положительное и немалое значение. В результате в системе наблюдается ферромагнитная фаза с достаточно высокой температурой Кюри. Аналогичные результаты получены для $Mn_3Si_2Te_6$ [17] и $Bi_{2-x}Mn_xTe_3$ [18] в экспериментах по рассеиванию нейтронов. Расчеты из первых принципов для $MnSb$ [19] также показали наличие конкуренции между ферромагнитным дальнедействием и антиферромагнитным близкодствием, что приводит к возможности существования ферромагнитной фазы.

Наши расчеты показывают, что для антиферромагнитной фазы рассматриваемой системы характерно критическое поведение модели Изинга с эффектами дальнего действия. В то же время критическое поведение в ферромагнитной фазе характеризуется критическими индексами обычной модели Изинга. Эти выводы также согласуются с экспериментальными результатами для EuO [2] и $MnBi$ [15].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mukherjee S., Raychaudhuri P., Nigman A. K. // Phys. Rev. B. 2000. **61**. P. 8651.
2. Menyuk N., Dwight K., Reed T. B. // Phys. Rev. B. 1971. **3**. P. 1689.
3. Mira J., Rivas J., Vazquez M. et al. // Phys. Rev. B. 1999. **59**. P. 123.
4. Cabassi R., Bolzoni F., Gauzzi A., Licci F. // Phys. Rev. B. 2006. **74**. 184425.
5. Perumal A., Srinivas V. // Phys. Rev. B. 2003. **67**. 094418.
6. Fisher M. E., Ma S.-k., Nickel B. G. // Phys. Rev. Lett. 1972. **29**. P. 917.
7. Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Кассан-Оглы Ф. А., Курбанова Д. Р. // ЖЭТФ. 2015. **147**, № 1. С. 127. (Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Kassin-Ogly F. A., Kurbanova D. R. // J. Exp. Theor. Phys. 2015. **120**. P. 110.)
8. Luijten E. // Phys. Rev. E. 1999. **60**. P. 7558.
9. Luijten E., Blote H. W. J. // Phys. Rev. B. 1997. **56**. P. 8945.
10. Белым С. В. // Письма в ЖЭТФ. 2003. **77**, № 2. С. 118. (Belim S. V. // JETP Lett. 2003. **77**. P. 112.)
11. Белым С. В. // Письма в ЖЭТФ. 2003. **77**, № 8. С. 509. (Belim S. V. // JETP Lett. 2003. **77**. P. 434.)
12. Белым С. В. // ЖЭТФ. 2004. **125**, № 2. С. 356. (Belim S. V. // J. Exp. Theor. Phys. 2004. **98**. P. 316.)
13. Белым С. В. // ЖЭТФ. 2004. **125**, № 2. С. 382. (Belim S. V. // J. Exp. Theor. Phys. 2004. **98**. P. 338.)
14. Binder K. // Phys. Rev. Lett. 1981. **47**. P. 693.
15. Williams T. J., Taylor A. E., Christianson A. D. et al. // Applied Physics Letters. 2016. **108**. 192403.
16. McGuire M. A., Cao H., Chakoumakos B. C., Sales B. C. // Phys. Rev. B. 2014. **90**. 174425.
17. May A. F., Liu Y., Calder S. et al. // Phys. Rev. B. 2017. **95**. 174440.
18. Talanov Yu., Sakhin V., Kukovitskii E. et al. // Applied Magnetic Resonance. 2017. **48**, N 2. P. 143.
19. Datta S. N., Hansda S. // Chem. Phys. Lett. 2015. **621**, N 4. P. 102.
20. Gama S., Coelho A. A., de Campos A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. **93**. 237202.

The Critical Behavior of the Antiferromagnetic Ising Model with Long-Range Interaction Effects**S. V. Belim^a, I. B. Larionov***F. M. Dostoevskiy Omsk State University, Omsk 644077, Russia.**E-mail: ^asbelim@mail.ru.*

In this paper, the antiferromagnetic Ising model with ferromagnetic long-range interaction is modeled by the Monte Carlo method. The case of ferromagnetic long-range forces decreasing by a power law is considered. The dependence of the phase-transition temperature on long-range interaction parameters is obtained. The phase diagram was constructed at different values of long-range interaction parameters. Conditions for the existence of the frustrated state of the system were revealed.

Keywords: critical phenomena, antiferromagnetic Ising model, long-range interaction.

PACS: 68.35.Rh.

Received 27 July 2017.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2018. **73**, No. 4. Pp. 394–397.

Сведения об авторах

1. Белим Сергей Викторович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (3812) 62-80-90, e-mail: sbelim@mail.ru.
2. Ларионов Игорь Борисович — канд. техн. наук, доцент; тел.: (3812) 62-80-90, e-mail: LarionovIB@omsu.ru.