УДК 538.911

DOI: 10.21779/2542-0321-2016-31-4-30-35

А.К. Муртазаев, Ж.Г. Ибаев, Я.К. Абуев

Исследование 2D ANNNI-модели методами Монте-Карло

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского 94;

Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; ibaev77@mail.ru

В природе помимо простых магнитных упорядочений (ферромагнитного, антиферромагнитного или ферримагнитного) существует еще и новый тип магнитного упорядочения – модулированное. Такое упорядочение возникает в системах с конкуренцией обменного взаимодействия независимо от физической природы этого взаимодействия. Наиболее распространенной моделью статистической физики, применяемой для описания модулированных структур, является анизотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель). Теоретическое и экспериментальное изучение моделированных структур является достаточно трудоемкой задачей, поэтому в настоящее время для их полного и всестороннего описания используют методы вычислительной физики, наиболее популярными и точными из которых являются методы Монте-Карло.

В данной работе приведены результаты исследования двумерной ANNNI-модели методами Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса. Получены температурные зависимости термодинамических параметров для кубической системы с линейными размерами $L = 32$ при различных значениях параметра конкурирующего взаимодействия $|J_1/J| = 0,1 \div 1$. Показано, что с увеличением абсолютного значения параметра конкурирующего взаимодействия температуры переходов из ферромагнитно упорядоченного состояния в парамагнитное при $|J_1/J| < 0,3$ и в модулированное при $0,3 < |J_1/J| < 0,5$ смещаются в сторону низких значений. Температуры переходов из модулированного состояния в парамагнитное, наоборот, увеличиваются. Показано, что в 2D ANNNI-модели модулированное упорядочение наблюдается в температурном интервале $0,1 < T < 2$, при $0,2 < |J_1/J| \leq 1$. Используя математический аппарат спектрального анализа, основанный на преобразованиях Фурье, мы рассчитали параметры модулированных структур. По результатам Фурье-анализа модулированных структур показано, что значение волнового числа растет с увеличением абсолютного значения параметра конкурирующего взаимодействия. Полученные результаты отображены на фазовой диаграмме двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями.

Ключевые слова: *конденсированное состояние, конкурирующее взаимодействие, модулированное упорядочение, Фурье-анализ.*

Введение

Успехи в изучении квазиодномерных и квазидвумерных магнетиков на основе соединений переходных металлов во многом обусловлены применением упрощенных многоэлектронных подходов с использованием моделей Гейзенберга и Изинга [1, 2]. Гамильтонианы этих моделей имеют довольно простую алгебраическую структуру. Это позволило доказать ряд теорем о характере точного энергетического спектра моделей и спиновой структуре основного состояния, которые имеют большое значение для тестирования результатов численного моделирования [6–8]. С другой стороны, как показы-

вает практика, основные заключения о магнитной структуре, полученные в рамках этих упрощенных моделей, как правило, сохраняются и при переходе к более строгим методам, например, учитывающим отталкивание электронов, расположенных на несоседних узлах кристаллической решетки [1, 6].

Модель Изинга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными взаимодействиями на кубической решетке (так называемая ANNNI-модель) была введена для описания упорядоченных магнитных фаз в кристаллах CeSb [8]. Аналогичная модель успешно используется для описания термодинамики масляных микроэмульсий и носит название модели Видома [9].

Рис. 1. Двумерная ANNNI-модель

В данной статье мы рассмотрим двумерный аналог такой модели (рис. 1), представляющий интерес для описания пленок микроэмульсий на поверхности твердых тел. Предполагается, что подобные модели могут быть использованы для оптимизации процессов экстракции, например, при нефтедобыче.

Гамильтониан модели:

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

где $s_i = \pm 1$, $J > 0$ – параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов, $J_1 < 0$ – параметр антиферромагнитного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими вдоль оси Y.

Для описания фазового поведения рассматриваемой модели были использованы приближенные теоретические методы, включая высоко- и низкотемпературные разложения, теорию среднего поля и другие теоретические аппроксимации.

Согласно литературным данным, с понижением температуры ANNNI-модель испытывает фазовый переход второго рода из парамагнитного в ближайшее упорядоченное состояние, а переход «ферромагнетик – модулированная фаза» является переходом первого рода [10].

Метод исследования и полученные результаты

Для исследования термодинамических и магнитных явлений использовались системы квадратной формы с периодическими граничными условиями и размерами $L \times L$; $L = 32$. Число спинов в моделируемой системе $N_{\text{эф}} = 1024$. На ЭВМ генерировались Марковские цепи длиной $\tau = 1000\tau_0$ ($\tau_0 = 10^4$ МК-шагов/спин – длина неравновесного участка). Усреднением вдоль этой цепи вычислялись термодинамические параметры системы. Кроме того, выполнялось усреднение по тысяче различных начальных конфигураций. При этом погрешность полученных результатов не превышает размеры используемых на рисунках символов.

Для исследования магнитных свойств модулированной области мы использовали величину

$$M_z = \frac{1}{L} \sum_x^L S_{x,y}, \quad (2)$$

представляющую собой усредненную намагниченность цепочки спинов, расположенных перпендикулярно оси Y. В качестве параметра порядка использовано усредненное значение амплитуды модулированной структуры.

Параметры модулированных структур и температуры переходов между ними определялись с помощью математического аппарата спектрального анализа, основанного на преобразованиях Фурье

$$M_z = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^N [a_k \cos(2\pi kz / L) + b_k \sin(2\pi kz / L)], \quad (3)$$

где

$$a_0 = \frac{1}{L} \sum_{z=1}^L M_z, \quad (4)$$

$$a_k = \frac{2}{L} \sum_{z=1}^L M_z \cos(2\pi kz / L), \quad (5)$$

$$b_k = \frac{2}{L} \sum_{z=1}^L M_z \sin(2\pi kz / L), \quad (6)$$

k – номер гармоники.

Поскольку модулированные структуры являются гармоническими, то волновое число q определяется значением k , при котором амплитудная функция $A_m = (a_k^2 + b_k^2)$ имеет максимум.

На рис. 2 представлено характерное упорядочение, возникающее в 2D ANNNI-модели при $L=32$, $|J_1/J|=1,0$, $t=1,95$, и соответствующий ему спектр Фурье. Как нетрудно увидеть по этому рисунку, данная структура является модулированной и ее можно приближенно описать с помощью гармонической функции:

$$M_z = A \cos(2\pi qz + \varphi), \quad (7)$$

где $A=0,749578$ – амплитуда модулированной структуры, $q=7/32$ – волновое число, $\varphi = 3,14$ – начальная фаза.

Рис. 2. Модулированная структура 2D ANNNI-модели при $L=32$, $|J_1/J|=1,0$, $t=1,95$ и его спектр Фурье

Рис. 3. Фазовая диаграмма 2D ANNNI-модели

Используя результаты Фурье-анализа модулированных структур, возникающих в 2D ANNNI-модели при $L=32$ и различных температурах и значениях параметра конкурирующего взаимодействия, мы построили фазовую диаграмму двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (рис. 3).

Как видно по рис. 3 в двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями область с модулированным упорядочением локализована при значениях $0,2 < |J_1/J| \leq 1$ и в температурном интервале $0,1 < T < 2$.

Заключение

Полученные результаты показывают, что термодинамика двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями является достаточно сложной. Причиной такого поведения являются различного рода анизотропные и конкурирующие взаимодействия, существующие в реальных системах. Учет всех возможных видов анизотропии и взаимодействий создает в системе различные типы магнитного

упорядочения и как следствие – мультикритические явления, что приводит к усложнению как термодинамического, так и критического поведения системы. Поэтому исследование подобных структур также является важным условием при рассмотрении термодинамических и магнитных свойств твердых тел. Разработка новых методов исследования и алгоритмов моделирования для исследования модулированного упорядочения может способствовать не только изучению различных нелинейных процессов, наблюдающихся в твердых телах, но и расширению применения методов Монте-Карло для изучения более сложных систем.

Литература

1. Овчинников А.А., Украинский И.И., Квенцель Г.Ф. Теория одномерных моттовских полупроводников и электронная структура длинных молекул с сопряженными связями // Успехи физических наук. – 1972. – Т. 108, № 1. – С. 81–111.
2. White S.R. Strongly correlated electron systems and the density matrix renormalization group // Phys. Reports. – 1998. – V. 301. – P. 187–204.
3. Moreira I., Dovesi R. Periodic approach to the electronic structure and magnetic coupling in KCuF_3 , K_2CuF_4 , and $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ low-dimensional magnetic systems // Int. J. Quant. Chem. – 2004. – V. 99. – P. 805–823.
4. Hitesh J. Changlani, Norm M. Tubman & Taylor L. Hughes Charge density waves in disordered media circumventing the Imry-Ma argument // Scientific Reports. – 2016. – V. 6. – P. 31897–31900.
5. Zeph Landau, Umesh Vazirani & Thomas Vidick A polynomial time algorithm for the ground state of one-dimensional gapped local Hamiltonians // Nature Physics. – 2015. – V. 11. – P. 566–569.
6. Alexey M. Shakirov, Sergey V. Tsibulsky, Andrey E. Antipov, Yulia E. Shchadilova & Alexey N. Rubtsov Modeling the metastable dynamics of correlated structures// Scientific Reports. – 2015. – V. 5. – P. 8005–8008.
7. Klein D.J. Ground-state features for Heisenberg models // Chem. Phys. – 1982. – V. 77, № 6. – P. 3098–3100.
8. Elliott R.J. Phenomenological discussion of magnetic ordering in the heavy rare-earth metals // Phys. Rev. – 1961 – V. 124. – P. 346–353.
9. Widom B. Lattice model of microemulsion // J. Chem. Phys. – 1986. – V. 84. – P. 6943–6954.
10. Murtazaev A.K., Ibaev J.G., Critical properties of an ANNNI-model in the neighborhood of multicritical Lifshitz point // Solid State Communications. – 2012. – V. 152. – P. 177–179.

Поступила в редакцию 13 ноября 2016 г.

UDC 538.911

DOI: 10.21779/2542-0321-2016-31-4-30-35

Study 2d ANNNI-model by the Monte-Carlo methods

A.K. Murtazayev, Zh.G. Ibayev, Ya.K. Abuyev

¹*Institute of Physics DSC RAS; Russia, 367003, Makhachkala, Yaragsky st., 94;*

²*Dagestan State University; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiyev st., 43a;*
ibaev77@mail.ru

In addition to the simple nature of magnetic ordering (ferromagnetic, antiferromagnetic or ferromagnetic) there is also a new type of magnetic ordering - modulated. Such ordering occurs in systems with the competition of the exchange interaction which is not dependent on the physical nature of this interaction. The most common model used in statistical physics to describe the modulated structures is anisotropic Ising model with competing interactions (ANNNI-model). Theoretical and experimental study of simulated structures is quite a tedious task, so the use of computational physics methods, the most popular and accurate of which are Monte Carlo methods is timely.

This paper presents the results of a study of two-dimensional model of the ANNNI-Monte Carlo methods based on standard Metropolis algorithm. As a result, the temperature dependence of the thermodynamic parameters for the cubic system with linear dimensions $L = 32$ for different values of competing interactions $|J_1/J| = 0,1 \div 1$ is calculated. It is shown that an increase in the absolute value of the parameter transitions competing reaction temperature of ferromagnetic ordering the paramagnetic state when $|J_1/J| < 0,3$ and modulated at $0,3 < |J_1/J| < 0,5$ are shifted toward lower values. The transition temperature of the modulation to the paramagnetic state the contrary increased. It is shown that in the 2D ANNNI-modulated pattern ordering is observed in the temperature range of $0,1 < T < 2,0$, with $0,2 < |J_1/J| \leq 1$. Using the mathematical apparatus of spectral analysis based on Fourier transforms, the authors calculated parameters of modulated structures. As a result of the Fourier analysis of the modulated structures, the value of the wave number increases with the absolute value of the parameter of competitive interactions. The results of the research held are reflected in a phase diagram of two-dimensional Ising anisotropic model with competing interactions.

Keywords: *condensed state, competing interactions, ordering modulated, Fourier analysis.*

Received 13 November, 2016