УДК 538.911

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-3-40-45

А.К. Муртазаев^{1,2}, Ж.Г. Ибаев^{1,2}, Я.К. Абуев¹

Расчет плотности состояний двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями методами Монте-Карло

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

² Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; ibaev77@mail.ru

Анизотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель) используется для описания термодинамического и магнитного поведения систем с длиннопериодическим модулированным упорядочением. Модулированные структуры представляют собой частный случай магнитного упорядочения систем, в которых наблюдаются периодические изменения компонентов магнитных моментов атомов вдоль кристаллографических направлений. Наиболее простой модулированной структурой является антиферромагнитная спираль или геликоид. Типичными представителями систем с таким упорядочением являются редкоземельные металлы Eu, Tb, Dy, Ho, соединение $MnAu_2$ и некоторые другие окисные соединения.

В данной работе приведены результаты исследования двумерной ANNNI-модели методами Монте-Карло с помощью алгоритма Ванга–Ландау. Рассчитаны плотности состояний и параметры порядка для кубической системы с линейными размерами $L = 16 \div 40$ при различных значениях конкурирующего взаимодействия $|J_1/J| = 0,1 \div 1,0$. Показано, что плотность распределения очень сильно зависит как от величины конкурирующего взаимодействия, так и от линейных размеров системы. При $|J_1/J| < 0,5$ плотность распределения имеет характерный куполообразный вид. Для значения $|J_1/J| = 0,6$ наблюдается резкий скачок плотности распределения, и с увеличением $|J_1/J|$ величина этого скачка уменьшается. В поведении параметра порядка наблюдается монотонный спад с увеличением энергии системы при $|J_1/J| < 0,3$. Дальнейший рост $|J_1/J|$ приводит к появлению небольшого скачка параметра порядка, который смещается в сторону высоких значений энергии при $|J_1/J| = 0,3; 0,4$.

Для значения $|J_1/J| = 0,5$ этот скачок исчезает, и при дальнейшем увеличении параметра конкурирующего взаимодействия смещается в сторону низких значений энергии и растет по величине. Физической причиной такого поведения является переход системы из однородно упорядоченного состояния в многократно вырожденную модулированную фазу.

Ключевые слова: конденсированное состояние, конкурирующее взаимодействие, модулированное упорядочение, плотность состояний.

Введение

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

Рассматриваемая модель является наиболее простой моделью статистической физики, используемой при изучении периодического магнитного упорядочения компонентов магнитных моментов атомов вдоль кристаллографических направлений. Наиболее простой модулированной структурой является антиферромагнитная спираль или геликоид. Типичными представителями систем с таким упорядочением являются редкоземельные металлы Eu, Tb, Dy, Ho, соединения MnAu_2 и некоторые другие окисные соединения. Антиферромагнитные магнитные спиральные структуры встречаются также в магнетиках с одноионной анизотропией, величина которой существенно меньше обменных взаимодействий [10–13]. С другой стороны, существует большой класс магнитных систем, в которых величина одноионной анизотропии превосходит обменные интегралы или сравнима с ними. Примерами таких систем являются редкоземельные металлы Dy, Tb [13], соединения CsFeBr_3 , CsFeCl_3 [14], в которых значение константы одноионной анизотропии достигает 20–30 К, а величина обменных интегралов принимает значения 3–5 и 0,3–0,4 К соответственно. К таким системам, для которых отношение константы одноионной анизотропии к обменному интегралу составляет примерно 40 и 4 соответственно, относятся также соединения типа $\text{NiZrF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{FeSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ [15].

В данной статье приведены результаты исследования двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (рис. 1), используемой в основном для описания пленок микроэмульсий на поверхности твердых тел. Подобные модели также предполагается использовать для описания процессов экстракции, встречающихся, например, при нефтедобыче.

Рис. 1. Двумерная ANNNI-модель

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 ферромагнитного обменного взаимодействия ближайших пар спинов, $J_1 < 0$ – параметр антиферромагнитного взаимодействия пар спинов, следующих за ближайшими вдоль оси Y .

В проведенных ранее исследованиях при описании термодинамического поведения рассматриваемой модели были использованы приближенные теоретические методы, такие, как высоко- и низкотемпературные разложения, теория среднего поля и т. д.

Согласно данным, полученным в этих исследованиях, при понижении температуры в ANNI-модели происходит два фазовых перехода: 1) фазовый переход второго рода из парамагнитного в ближайшее упорядоченное состояние; 2) фазовый переход первого рода из ферромагнитно упорядоченного состояния в модулированную фазу [16].

Методика исследования и полученные результаты

При проведении исследований на ЭВМ формировались спиновые системы квадратной формы $L \times L$ с размерами $L = 32$ ($N_{эф} = L \times L = 1024$). Для исключения граничных эффектов на рассматриваемые системы накладывались периодические граничные условия. Моделирование выполнялось при помощи высокоэффективного алгоритма Ванга–Ландау [17]. Использование данного алгоритма позволяет рассчитать распределение плотности состояний и основную спиновую конфигурацию системы. На рис. 2 приведены графики распределения плотности состояний для системы с $L = 32$ при значениях $|J_1/J| = 0,1 \div 1,0$.

Рис. 2. Плотность распределения состояний

Рис. 3. Распределение параметра порядка

Отметим, что характер распределения плотности состояний зависит как от линейных размеров системы, так и от величины конкурирующего обменного взаимодействия. Как видно по рис. 2, плотности распределения имеют куполообразный вид для всех значений параметра $|J_1/J|$, кроме значения $|J_1/J| = 0,6$. Для последнего значения наблюдается скачкообразное увеличение значения плотности состояний. Такое поведение наблюдается при увеличении линейных размеров системы и для значений $|J_1/J| = 0,7; 0,8; 1,0$, начиная с $L = 32$. Это можно объяснить ростом числа возможных модулированных фаз при увеличении линейных размеров и переходом системы из основного со-

стояния в различные многократно вырожденные модулированные состояния.

В процессе моделирования также получено распределение параметра порядка M по энергетическим состояниям системы. В качестве параметра порядка использовалась величина

$$M = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L_y} |m_i|, \quad (2)$$

где $m_i = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L_x} S_{ij}$ – усредненное значение спина в слое, перпендикулярном направлению оси OY , $i = 1 \dots L_y$ – номер слоя.

На рис. 3 показан график такого распределения для системы с $L = 32$ при $|J_1/J| = 0,1 \div 1,0$. По рис. 3 видно, что для фиксированного значения L характер распределения параметра порядка от энергии зависит от величины конкурирующего взаимодействия. Для значений $|J_1/J| \leq 0,2$ с ростом энергии наблюдается монотонное уменьшение величины M , характерное для непрерывного перехода системы из однородно упорядоченного состояния в разупорядоченное. При значениях $|J_1/J| = 0,3$ и $0,4$ наблюдаются небольшие скачки распределения параметра порядка, смещающиеся в сторону высоких энергий с увеличением $|J_1/J|$ и свидетельствующие о переходе системы из основного состояния в модулированное. При $|J_1/J| \geq 0,5$ скачки параметра порядка более четко выражены, увеличиваются по величине и смещаются в сторону более низких значений энергии с ростом $|J_1/J|$.

Заключение

Полученные результаты показывают, что учет различных видов взаимодействий приводит к усложнению термодинамических и магнитных свойств изучаемых систем. Причиной такого усложнения являются анизотропные и конкурирующие взаимодействия, существующие в реальных системах. Учет различных видов анизотропии и взаимодействий создает в системе новые типы магнитного упорядочения, мультикритические явления, изменения как термодинамического, так и критического поведения системы. В частности, в рассматриваемой нами двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями учет конкуренции обменного взаимодействия приводит к появлению нового типа магнитного упорядочения – длиннопериодических модулированных магнитных структур. Исследование подобных структур является важной задачей при изучении термодинамических и магнитных свойств твердых тел. Помимо этого расчеты остальных термодинамических параметров системы, которые проводились усреднением по значениям плотности состояний системы, позволяют более детально описать характер термодинамического и магнитного поведения анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями.

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. Изюмов Ю.А. Модулированные, или длиннопериодические, магнитные структуры кристаллов // *УФН.* – 1984. – Т. 144. – С. 439.

11. Бучельников В.Д., Шавров В.Г. Магнитоупругие волны в геликоидальных магнетиках // *ФТТ.* – 1988. – Т. 30. – С. 1167.

12. Гиппиус А.А., Москвин А.С., Морозова Е.Н., Охотников К.С. Магнитная структура двухподсистемного антиферромагнетика $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_4\text{Cl}_2$: по данным ЯКР // *ЖЭТФ.* – 2007. – Т. 132. – С. 99.

13. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. – М.: Наука, 1988. – 231 с.

14. Калита В.М., Локтев В.М. Многоподрешеточная магнитная фаза, индуцированная внешним полем в синглетном магнетике // *ЖЭТФ.* – 2004. – Т. 125. – С. 1149.

15. Борисенко В.Г., Переверзев Ю.В. Квантовые особенности фазовых диаграмм легкоплоскостных антиферромагнетиков в магнитном поле // *ФНТ.* – 1985. – Т. 11. – С. 730.

16. 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.

17. Wang F., Landau D.P. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 86. – P. 2050–2053.

Поступила в редакцию 22 марта 2018 г.

UDC 538.911

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-3-40-45

2d annni-model study by the Monte-Carlo methods

A.K. Murtazaev^{1,2}, Zh.G. Ibaev^{1,2}, Ya.K. Abuev²

¹ *Institute of Physics, Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences; Russia, 367003, Makhachkala, M. Yaragsky st., 94;*

² *Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a; ibaev77@mail.ru*

The anisotropic Ising model with competing interactions (ANNNI model) is used to describe the thermodynamic and magnetic behavior of systems with long-period modulated ordering. Modulated structures are a special case of magnetic ordering of systems in which periodic changes in the components of the magnetic moments of atoms along the crystallographic directions are observed. The simplest modulated structure is an antiferromagnetic helix or helicoid. Typical representatives of systems with such ordering are rare earth metals Eu, Tb, Dy, Ho, compound MnAu₂ and some other oxide compounds.

The paper presents the results of a study of two-dimensional model of the ANNNI-Monte Carlo methods based on standard Metropolis algorithm. The temperature dependence of the thermodynamic parameters for the cubic system with linear dimensions $L = 16 \div 40$ for different values of competing interactions $|J_1/J| = 0,1 \div 1,0$ are calculated. It is shown that the distribution density is very strongly dependent on the magnitude of the competing interaction, and on the linear dimensions of the system. At $|J_1/J| < 0,5$, the distribution density has a characteristic dome-shaped appearance. For the value $|J_1/J| = 0,6$, a sharp jump in the distribution density is observed, and with an increase in $|J_1/J|$ the magnitude of this jump decreases. In the behavior of the order parameter, a monotonous decrease with an increase in the system energy at $|J_1/J| < 0,3$ is observed. Further growth $|J_1/J|$ leads to the appearance of a small jump in the order parameter, which shifts towards high energy values at $|J_1/J| = 0,3; 0,4$.

For the value $|J_1/J| = 0,5$, this jump disappears, and with a further increase in the parameter of the competing interaction, it shifts toward lower energies and increases in magnitude. The physical reason for this behavior is the transition of the system from a uniformly ordered state to a multiply degenerate modulated phase.

Keywords: *condensed state, competing interaction, modulated ordering, density of states.*

Received 22 March, 2018