

Компьютерное моделирование фазового перехода в антиферромагнетиках с эффектами дальнего действия

И.Б. Ларионов
me@g0gi.ch

С.В. Белим
belimsv@omsu.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация

В статье осуществлено компьютерное моделирование фазового перехода в антиферромагнитных системах с учетом взаимодействия соседей, следующих за ближайшими. Рассмотрен случай степенного убывания дальнедействующих сил. Получена фазовая диаграмма системы. Вычислены параметры фазовых переходов.

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 отличное от модели Изинга ($\gamma = 1.241$, $\beta = 0.325$). Данные отклонения объясняются необходимостью учета взаимодействия не только между ближайшими спинами, но и 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

Copyright © by the paper's authors. Copying permitted for private and academic purposes.

In: Sergey V. Belim, Nadezda F. Bogachenko (eds.): Proceedings of the Workshop on Data, Modeling and Security 2017 (DMS-2017), Omsk, Russia, October 2017, published at <http://ceur-ws.org>

реализуется фазовый переход второго рода. Определено значение отношения констант ближкодействия и дальнодействия, 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, 9, 10, 11, 12, 13]. Результаты ε -разложения [8, 9] и дальнейшие более точные расчеты непосредственно в трехмерном пространстве [10, 11, 12, 13] показали, что режим критического поведения существенно зависит от скорости убывания взаимодействия с расстоянием.

1 Описание системы

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга с эффектами дальнодействия 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 -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$), J – значение обменного интеграла, b – интенсивность дальнодействия, показывающая относительный вклад эффектов дальнодействия по сравнению с ближкодействием, σ – параметр дальнодействия, показывающий скорость убывания дальнодействующих 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 ближайшей соседней, учитываются также спины, расположенные внутри сферы радиусом $2a$, где a – постоянная решетки.

Из вида Гамильтониана можно сделать вывод о том, 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 ниже, вследствие влияния соседней, 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 дальнодействия. 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 конечноразмерного скейлинга, показано, что кумулянты Биндера для систем разного размера пересекаются в точке, соответствующей критической температуре.

Для системы исследовалась 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 конечноразмерного 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

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

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 параметр 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 компьютерного эксперимента

Фазовая диаграмма системы для значений параметра $\sigma = 1.6$ представлена на рисунке 1. Как и ожидалось, присутствует три фазы. Линии фазовых переходов и фрустрированного состояния являются прямыми.

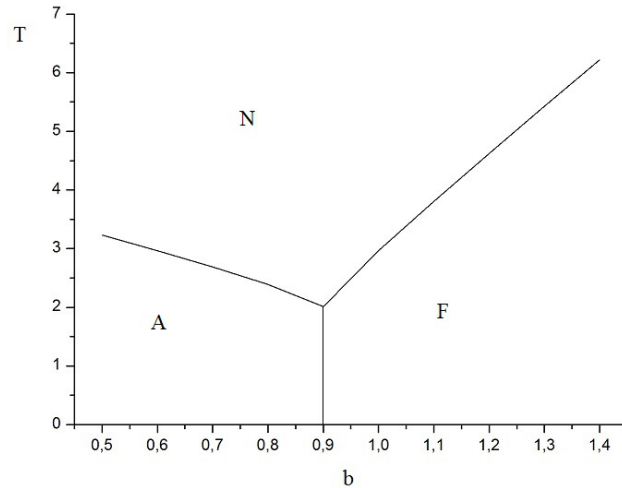


Рис. 1: Фазовая диаграмма системы при $\sigma = 1.6$. N – неупорядоченная фаза, F – ферромагнитная фаза, A – антиферромагнитная фаза

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

На рисунке 4 представлено поведение магнитной восприимчивости для систем различного размера при $\sigma = 1.6$ $b = 1.1$

На рисунке 5 представлено поведение антиферромагнитной восприимчивости для систем различного размера при $\sigma = 1.6$ $b = 0.7$

Из представленных графиков можно сделать вывод о том, что общий вид фазовой диаграммы остается неизменным при любой скорости убывания дальнего действия с расстоянием. Изменение показателя степени σ приводит к параллельному смещению линий фазовых переходов. При любом значении параметра дальнего действия σ линии фазовых переходов пересекаются при $b = 0.9$. При этом же значении b наблюдается фрустрированное состояние вещества при температурах ниже температуры фазового перехода. Из графиков зависимости восприимчивости от температуры можно сделать вывод о том, что оба фазовых перехода относятся ко второму роду.

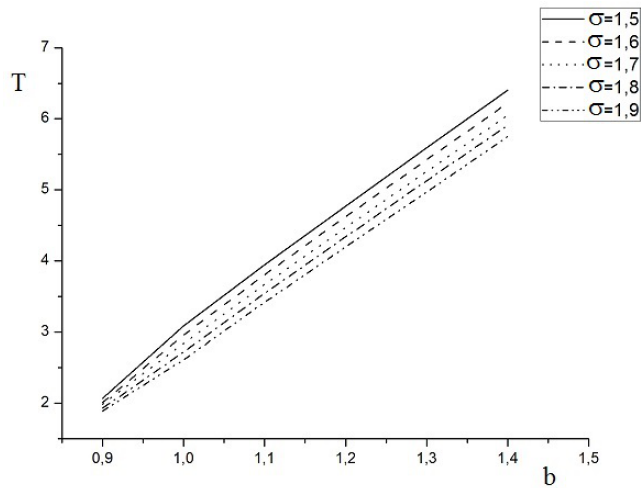


Рис. 2: Зависимость температуры Кюри от параметра b при различных значениях σ

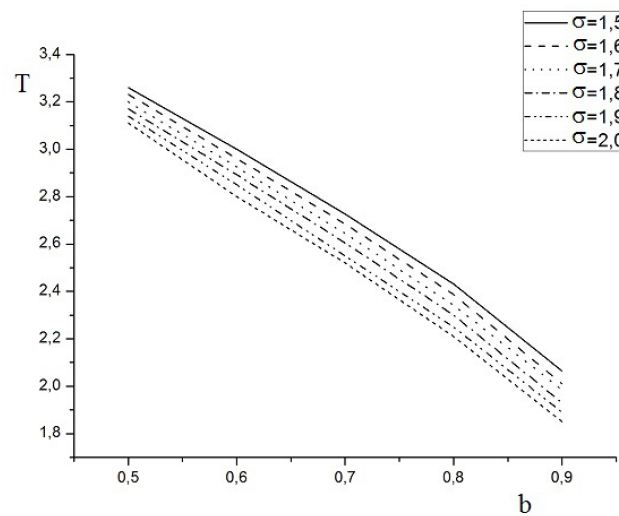


Рис. 3: Зависимость температуры Нееля от параметра b при различных значениях σ

Список литературы

- [1] S. Mukherjee, P. Raychaudhuri, A.K. Nigman. Critical behavior in $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$. *Phys. Rev. B*, 61:8651–8653, 2000.
- [2] N. Menyuk, K. Dwight, T.B. Reed. Critical Magnetic Properties and Exchange Interactions in EuO. *Phys. Rev. B*, 3:1689–1698, 1971.
- [3] J. Mira, J. Rivas, M. Vazquez, J.M. Garcia-Beneytez, J. Arcas, R.D. Sanchez, M.A. Senaris-Rodriguez. Critical exponents of the ferromagnetic-paramagnetic phase transition of $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ ($0.20 < x < 0.30$). *Phys. Rev. B*, 59:123–126, 1999.
- [4] R. Cabassi, F. Bolzoni, A. Gauzzi, F. Licci. Critical exponents and amplitudes of the ferromagnetic transition in $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$. *Phys. Rev. B*, 74:184425–184430, 2006.
- [5] A. Perumal, V. Srinivas. Critical behavior of weak itinerant ferromagnet $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ ($0 < x < 16$) alloys. *Phys. Rev. B*, 67:094418–094423, 2003.
- [6] M.E. Fisher, S.-K. Ma, B.G. Nickel. Critical Exponents for Long-Range Interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 29:917–920, 1972.

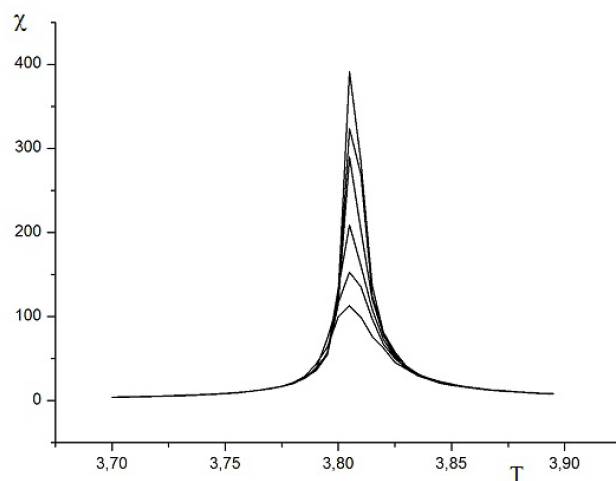


Рис. 4: Зависимость магнитной восприимчивости от температуры для систем различного размера при $\sigma = 1.6$ $b = 1.1$

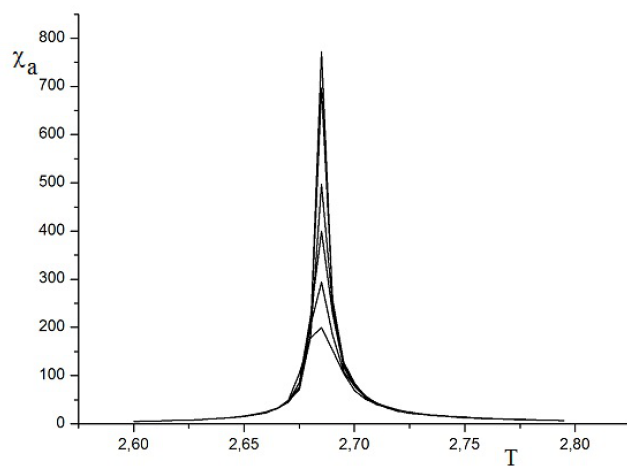


Рис. 5: Зависимость антиферромагнитной восприимчивости от температуры для систем различного размера при $\sigma = 1.6$ $b = 0.7$

- [7] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, F.A. Kassar-Ogly, D.R. Kurbanova. Phase transitions in the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with interactions between next-to-nearest neighbors. *J. Exp. Theor. Phys.*, 120:110–114, 2015.
- [8] E. Luijten. Test of renormalization predictions for universal finite-size scaling functions. *Phys. Rev. E*, 60:7558–7561, 1999.
- [9] E. Luijten, H.W.J. Blote. Classical critical behavior of spin models with long-range interactions. *Phys. Rev. B*, 56:8945–8958, 1997.
- [10] S.V. Belim Influence of long-range effects on the critical behavior of three-dimensional systems. *JETP Lett.*, 77:112–114, 2003.
- [11] S.V. Belim. Effect of long-range interactions on the critical behavior of three-dimensional disordered systems. *JETP Lett.*, 77: 434–437, 2003.
- [12] S.V. Belim. Effect of elastic deformations on the critical behavior of disordered systems with long-range interactions. *J. Exp. Theor. Phys.*, 98:316–321, 2004.

- [13] S.V. Belim. Effect of long-range interactions on the multicritical behavior of homogeneous systems. *J. Exp. Theor. Phys.*, 98:338–441, 2004.
- [14] K. Binder. Critical Properties from Monte-Carlo Coarse-Graining and Renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 47:693–696, 1981.

Computer Simulation of Phase Transition in Antiferromagnetic Systems with Long-Range Effect

Igor B. Larionov, Sergey V. Belim

In article computer simulation of phase transition in antiferromagnetic systems taking into account interaction of the next to neighbors is realized. The case of degree decrease of long-range forces is considered. The system phase diagram is constructed. The parameters of phase transitions is calculated.