Дагестанский научный центр
Российской академии наук
Институт физики
Лаборатория вычислительной физики и
физики фазовых переходов
367003, Российская Федерация, Махачкала, Ярагского, 94, Институт физики ДагНЦ РАН
тел: (8722) 62-66-75, (8722) 62-89-00 факс: (8722) 62-89-00 e-mail: m_akai@iwt.ru

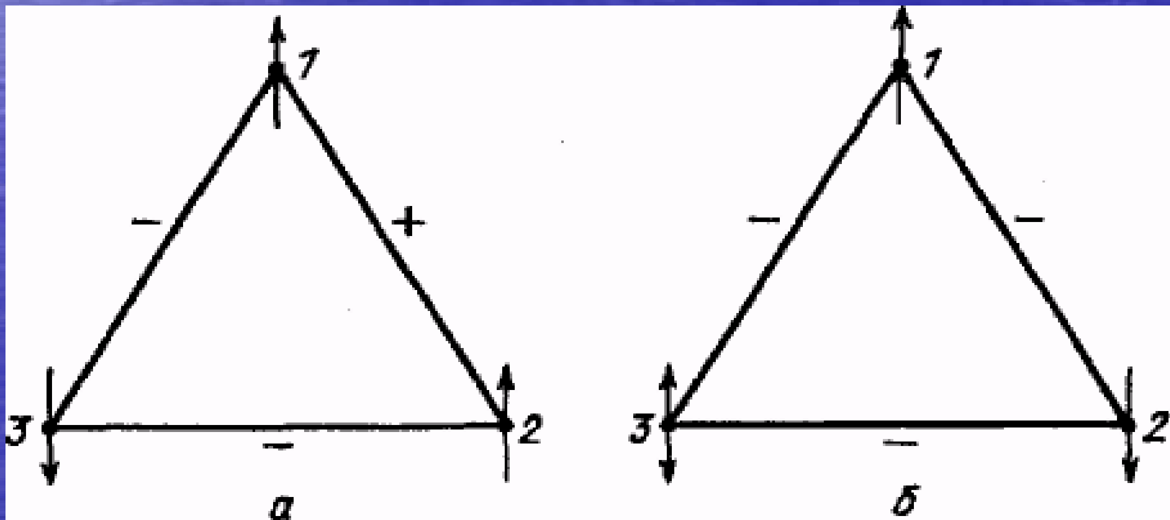
ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ.

***М.К. Рамазанов**, А.К. Муртазаев, М.К. Бадиев*
Институт физики ДагНЦ РАН, 367003, Махачкала, Россия
e-mail: sheikh77@mail.ru

Исследование ФП и КЯ ФС – предмет интенсивных исследований и дискуссий последних десятилетий!!!!!

Существуют 3 точки зрения:

1. Универсальное поведение ФС.
2. ФП 2 рода и новый класс универсальности КП
3. ФП 1 рода.



Фрустрации в системе из трех спинов.

Модели фрустрированных систем:

1. Stacked triangular antiferromagnetic lattices (STA)
2. Body–centered tetragonal (bct) Helimagnets
3. The simple cubic J_1–J_2 lattice
4. Villain lattice and fully frustrated simple cubic lattice
5. Face–centered cubic lattice (fcc)
6. Hexagonal–close–packed lattice (hcp)
7. Stacked Triangular Antiferromagnetic lattices with Rigidity (STAR)
8. Dihedral lattices $V_{N,2}$
9. Right–handed trihedral lattices $V_{3,3}$

Антиферромагнитная трехмерная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Гамильтониан

$$H = -J\sum_{\langle ij\rangle}(\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j) - J^{'}\sum_{\langle ik\rangle}(\vec{S}_i\cdot\vec{S}_k),$$

где $\vec{S}_i$ – трехкомпонентный единичный вектор , $\vec{S}_i = \left(S_i^x, S_i^y, S_i^z\right)$

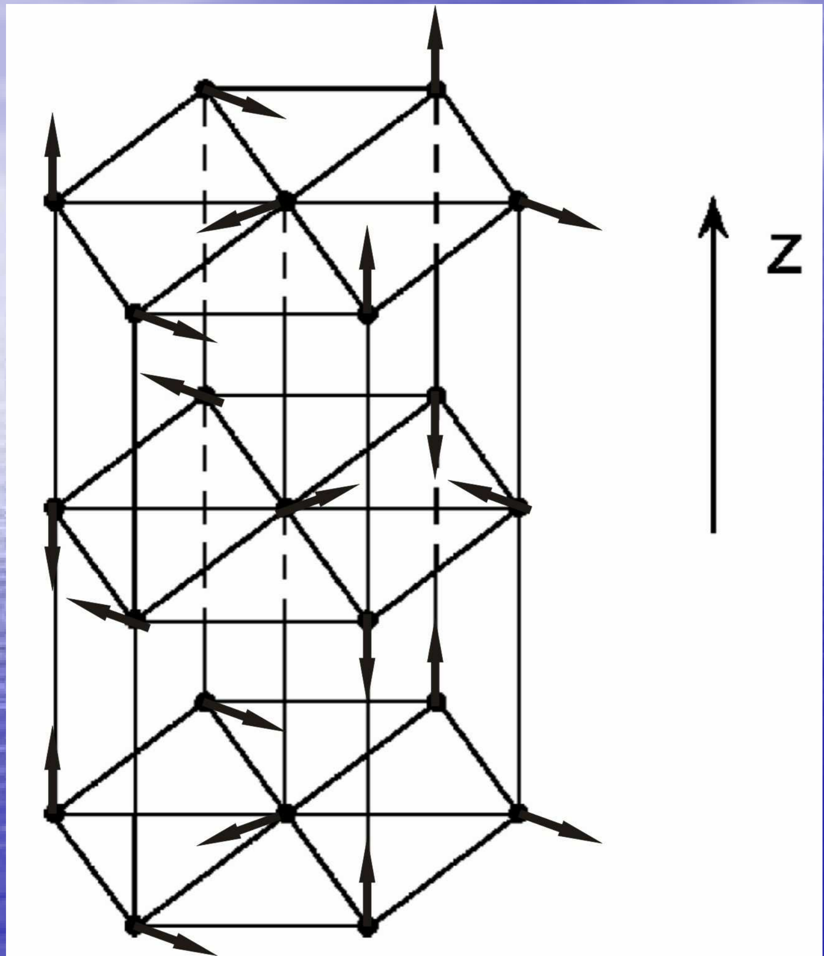
***J<0* и *J' <0* – константы антиферромагнитного обменного взаимодействия.**

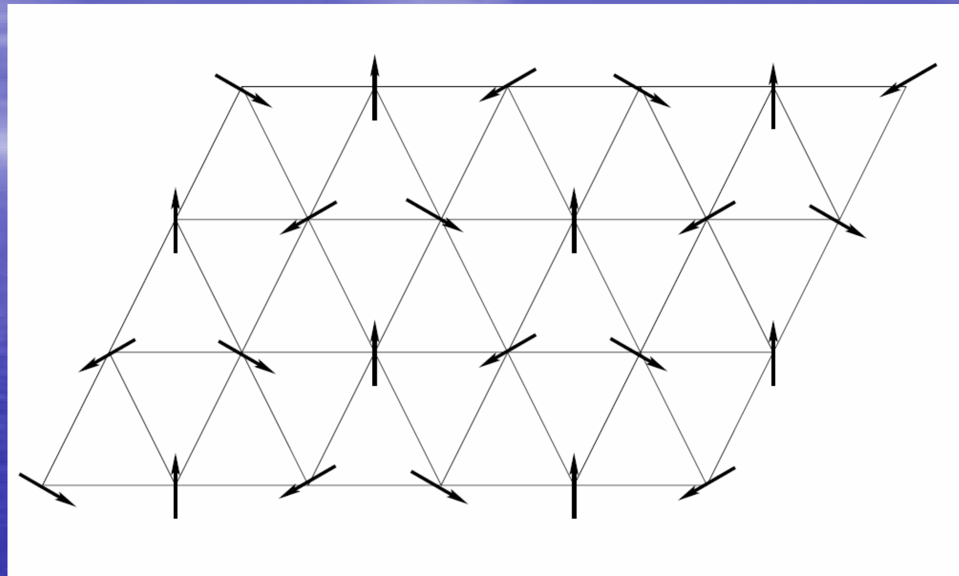
Первый член - характеризует взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковой как внутри слоёв, так и между слоями.

Второй член - характеризует взаимодействие вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое.

$R = J^{'}/J$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей.

Решетка состоит из двумерных треугольных слоев сложенных по ортогональной оси.



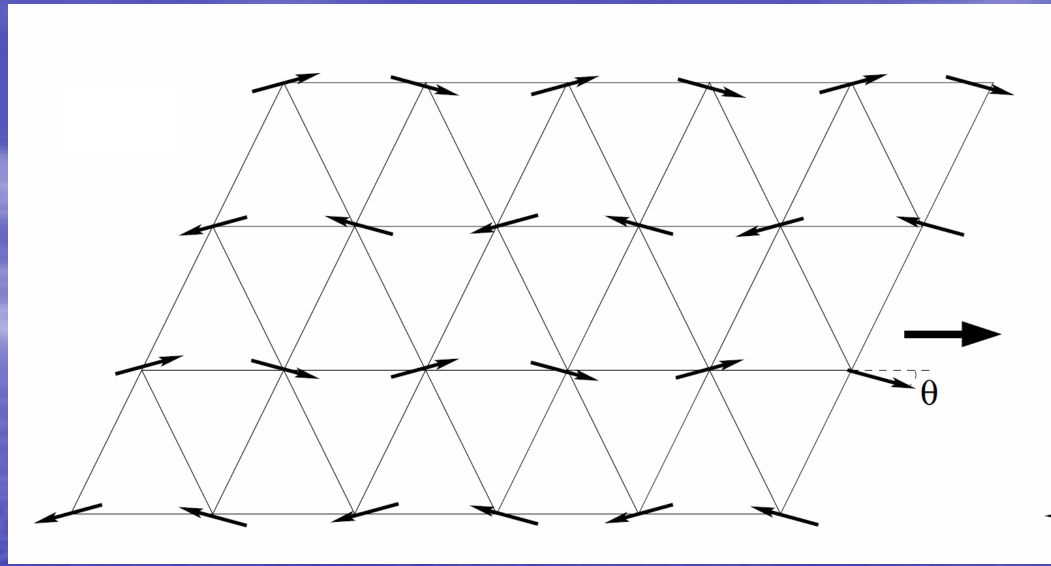


Основное состояние системы для случая R=0.

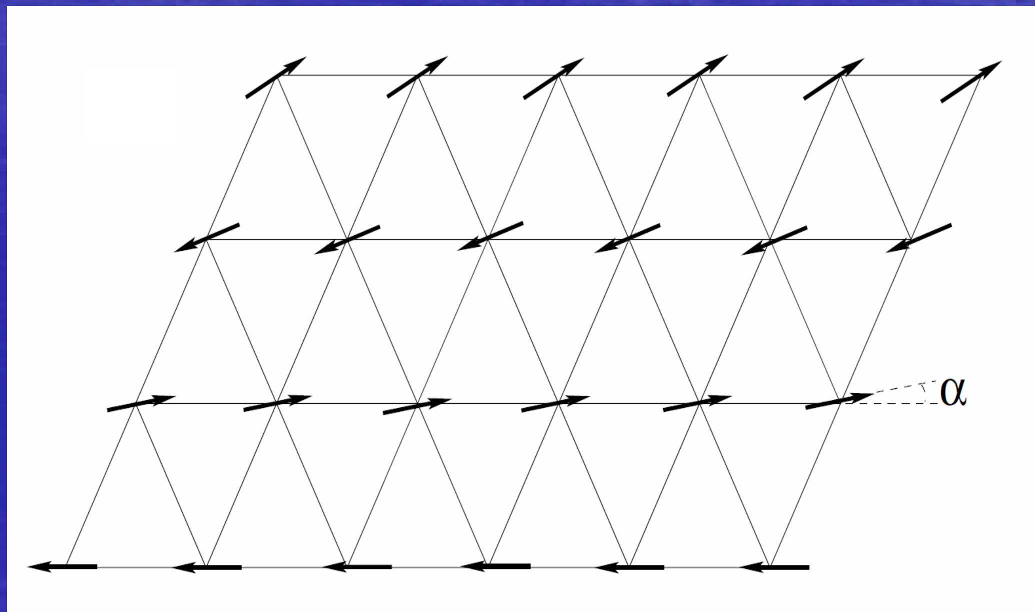
(120^0 структура)

Фрустрации обусловлены геометрией решетки

Основное состояние системы для случая *0.125≤R≤1*



Основное состояние системы для случая *R>1*



Интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами:

1. Фрустрированные системы обладают необычными магнитными свойствами, имеют богатое разнообразие фаз и фазовых переходов !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

2. Существование нового кирального класса универсальности ?????????????????????????????????

3. Природа ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ и зависимость характера ФП от различных факторов (учета взаимодействия вторых ближайших соседей и др.) ?????

ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ:

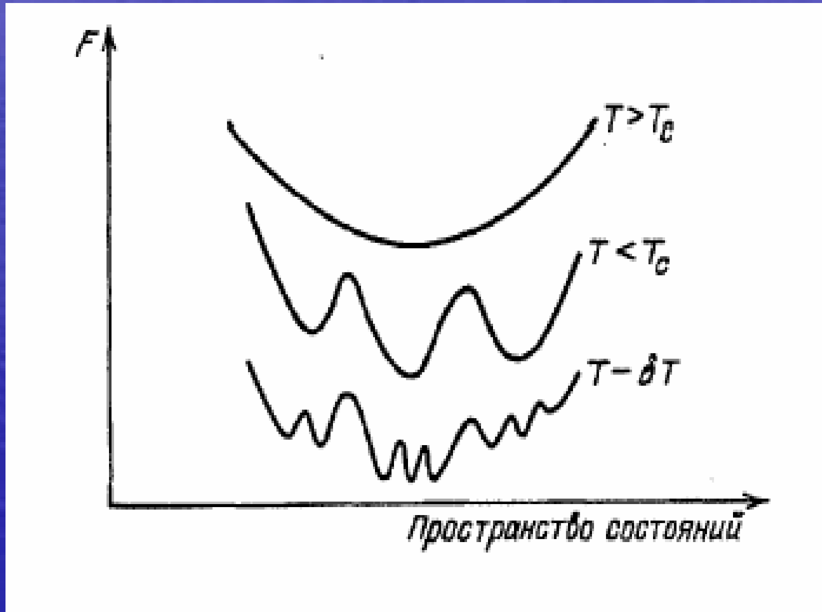
Значения критических показателей для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Ссылка	L_{max}	α	β	γ	ν	η	β_k	γ_k	ν_k
1	60	0.24(8)	0.30(2)	1.17(7)	0.59(2)	-	0.55(2)	0.72(2)	0.60(2)
2	36	-	0.285	1.185	0.586	-	0.50(2)	0.82(2)	0.60(2)
3	48	-	0.289	1.176	0.585	-	-	-	-
4	36	-	0.28	-	0.59	-	-	-	-
5	80	ФП 1 го рода							
6	150	ФП 1 го рода							
7	-	ФП 1 го рода							

1. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 1299 (1992), 58, 584 (1989), 56,474 (1987)
2. M.L. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B 50, 16113 (1994)
3. T. Bhattacharya, A. Billoire, R. Lacaze and Th. Jolicoeur, J. Phys. I (Paris) 4, 181 (1994)
4. D. Loison and H.T. Diep, Phys. Rev. B 50, 16453 (1994)
5. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn 72, 74 (2003)
6. V. Thanh Ngo and H.T. Diep, Phys. Rev. E 78, 031119 (2008).
7. M. Tisser, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Phys.Rev. Lett. 84, 5208 (2000).

Проблемы исследования

1. Критического замедления
2. Многочисленные локальные минимумы энергии.



Поведение структуры рельефа свободной энергии при понижении температуры.

Справиться с трудностями помогают:

1. Репличные алгоритмы метода Монте Карло;
2. Усреднение по начальным конфигурациям.

Метод исследования

Репличные алгоритмы метода МК
позволяют избегать замораживания системы в состояниях с минимальной энергией:

1. **Мультиканонический алгоритм - выполняется случайное блуждание по энергетическим минимумам.**

2. **Алгоритм расширенного ансамбля - выполняется случайное блуждание в температурном интервале, что стимулирует случайное блуждание по энергетическим минимумам.**

3. **1/*k*-выборочный алгоритм – основан на случайном блуждании по энтропии, которое в свою очередь позволяет стимулировать случайное блуждание в поле потенциальной энергии.**

4. **Репличный обменный алгоритм - выполняется случайное блуждание по температурному интервалу.**

Наиболее эффективным считается
репличный обменный алгоритм.

Репличный обменный алгоритм метода МК

Репличный обменный алгоритм был развит для параллельного моделирования системы при разных температурах.

Преимущество:

Легкость определения вероятности. Эта вероятность пропорциональна больцмановскому фактору.

Недостаток:

Для увеличения эффективности требуется увеличение числа реплик, что требует больших компьютерных мощностей для моделирования сложных систем.

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются независимо друг от друга обычным методом МК две реплики X и X′ с разными температурами T и T′.

2. После выполнения 100 МКшагов/спин эти реплики обмениваются данными в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

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

где $\Delta = (U - U') \cdot (1/k_B T - 1/k_B T')$

***U* и *U′* - внутренняя энергия первой и второй реплики соответственно.**

***T* и *T′* - температуры реплик.**

Расчеты проводились для систем с ПГУ и с линейными размерами $L\times L\times L=N$, $L=12\div30$.

Рассчитываемые параметры:

ТЕПЛОЕМКОСТЬ

$$C=(NK^2)\left(\langle U^2\rangle-\langle U\rangle^2\right)$$

ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

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

КУМУЛЯНТ БИНДЕРА

$$U_L=1-\frac{\langle m^4\rangle_L}{3\langle m^2\rangle_L^2}$$

$$V_L=1-\frac{\langle U^4\rangle_L}{3\langle U^2\rangle_L^2}$$

где V_L – энергетический кумулянт,
U_L – магнитный кумулянт.

$$K=|J|/k_BT,$$

Рассчитываемые параметры:

Магнитный параметр порядка:

M_A, M_B и M_C - намагниченности трех подрешеток, соответственно.

$$m = \frac{3}{N}\sqrt{\left\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \right\rangle / 3}$$

$$\left\langle \left| \vec{M}_r \right| \right\rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle$$

r = A, B,C

Киральный параметр порядка:

p=(*x*,*y*,*z*) – нумерует треугольные плакеты

$$m_k = \frac{1}{n}\sum_p m_{k\,p}$$

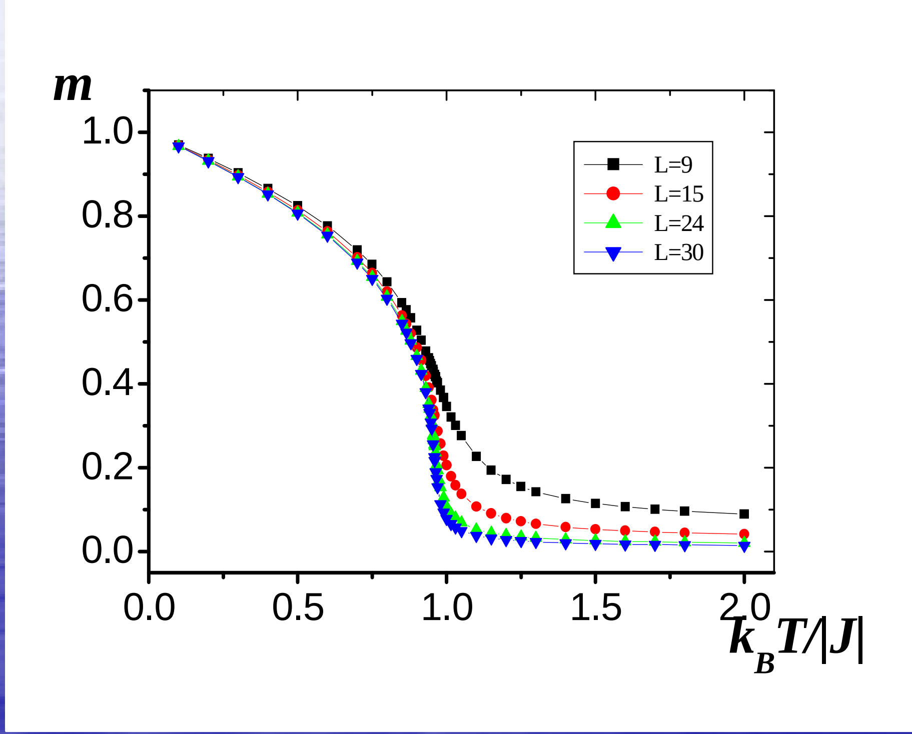
$$m_{k\,p} = \frac{2}{3\sqrt{3}}\sum_{\langle ij \rangle}\left[S_i \times S_j\right]_p$$

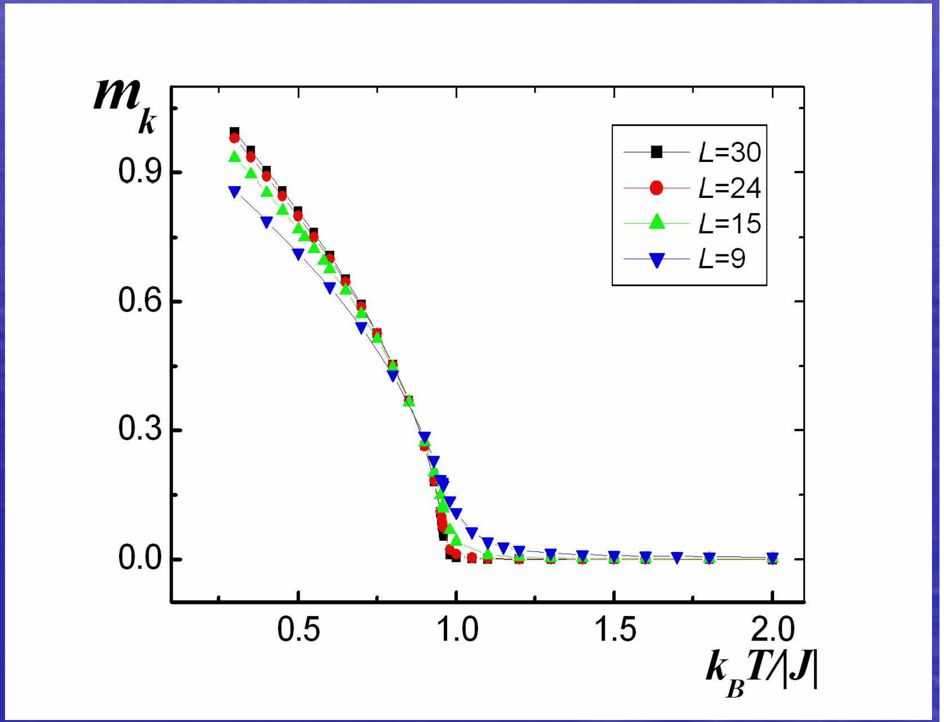
Киральная восприимчивость:

$$\chi_k = \begin{cases} (NK)\left(\left\langle m_k^{\,2} \right\rangle - \left\langle \left| m_k \right| \right\rangle^2\right), & T < T_k \\ (NK)\left\langle m_k^{\,2} \right\rangle, & T \geq T_k \end{cases}$$

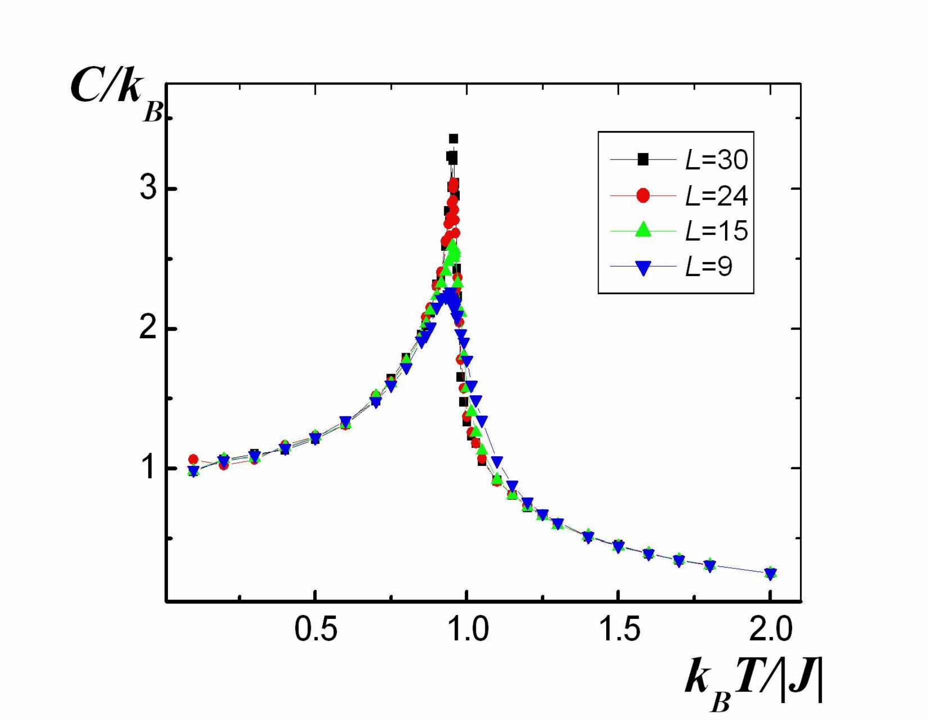
Зависимость магнитного m и кирального параметра порядка m_k от температуры $k_BT/|J|$.

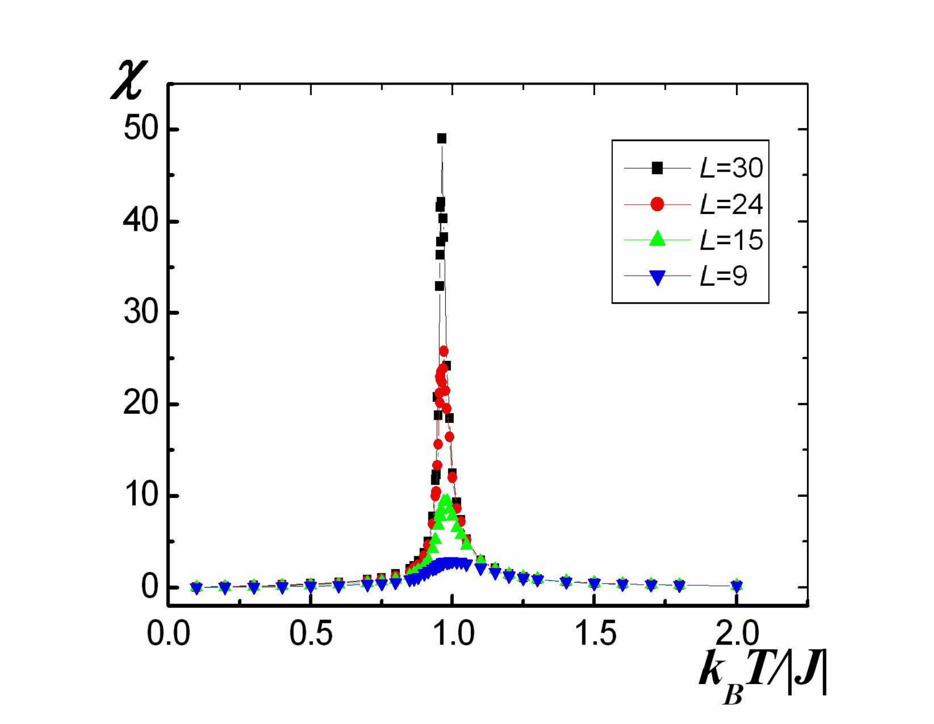
R=0





Зависимость теплоемкости и восприимчивости от температуры $k_B T/|J|$.

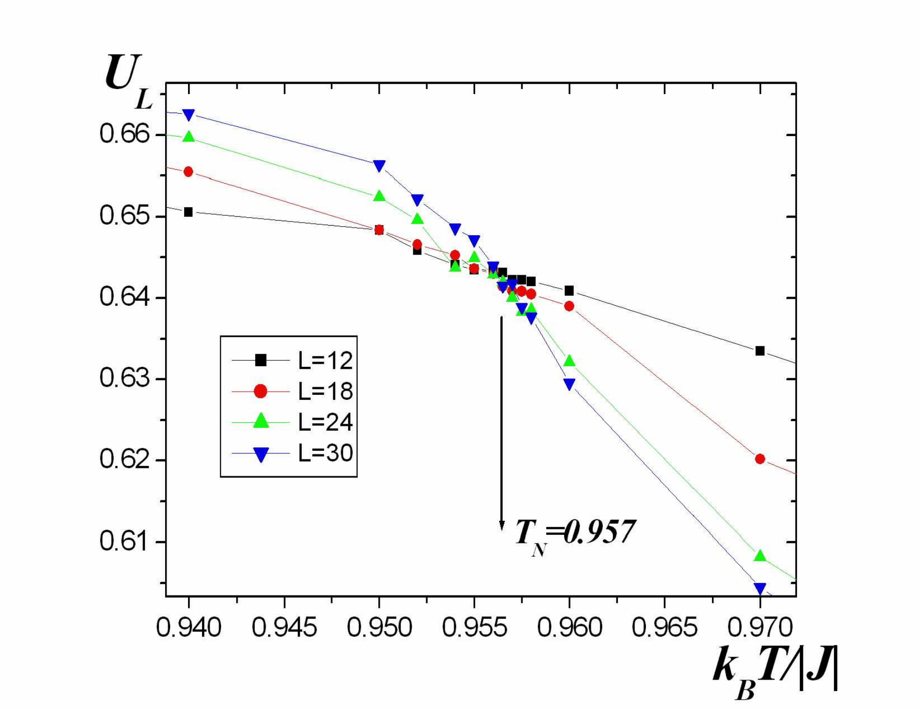


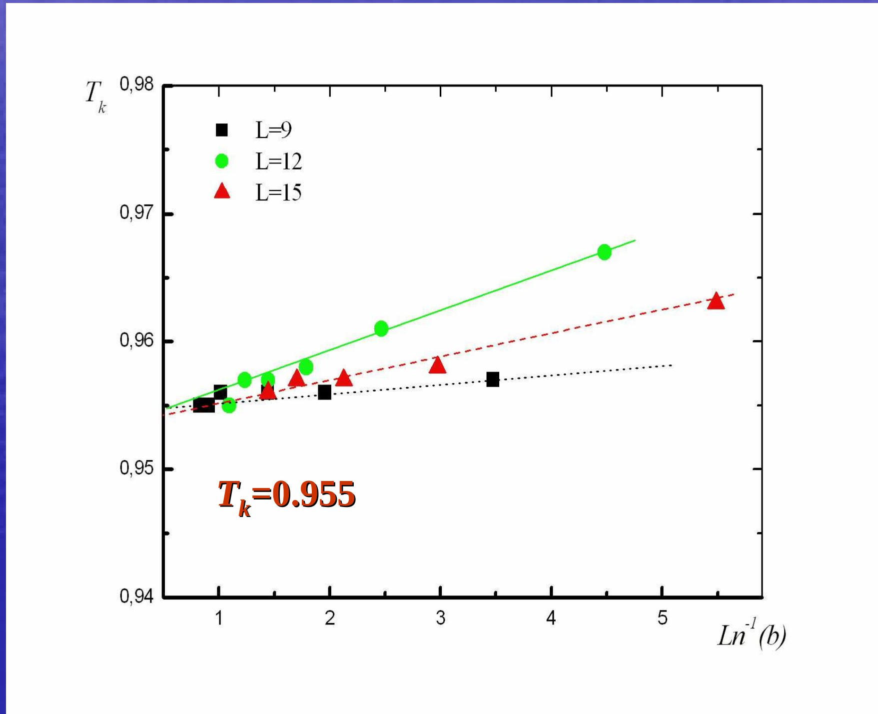


Определение критической температуры T_N.

Метод кумулянтов Биндера

Метод пересечения кумулянтов
(“cumulant crossing”)





Зависимость Кумулянта Биндера от температуры.

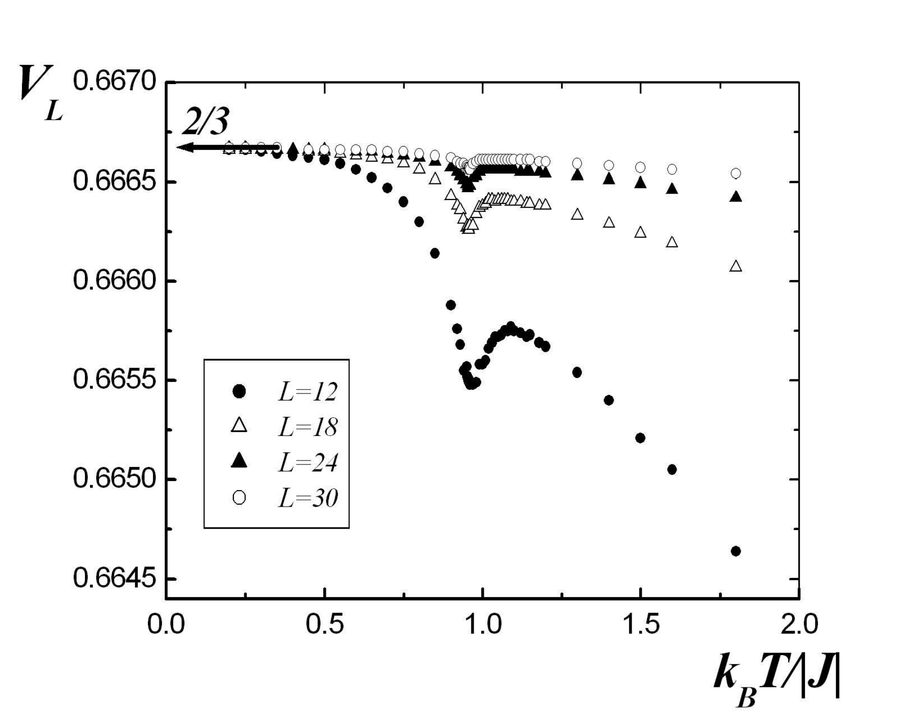
Зависимость температуры T_k от $ln^{-1}(b)$ для разных L, где $b=L'/L$.

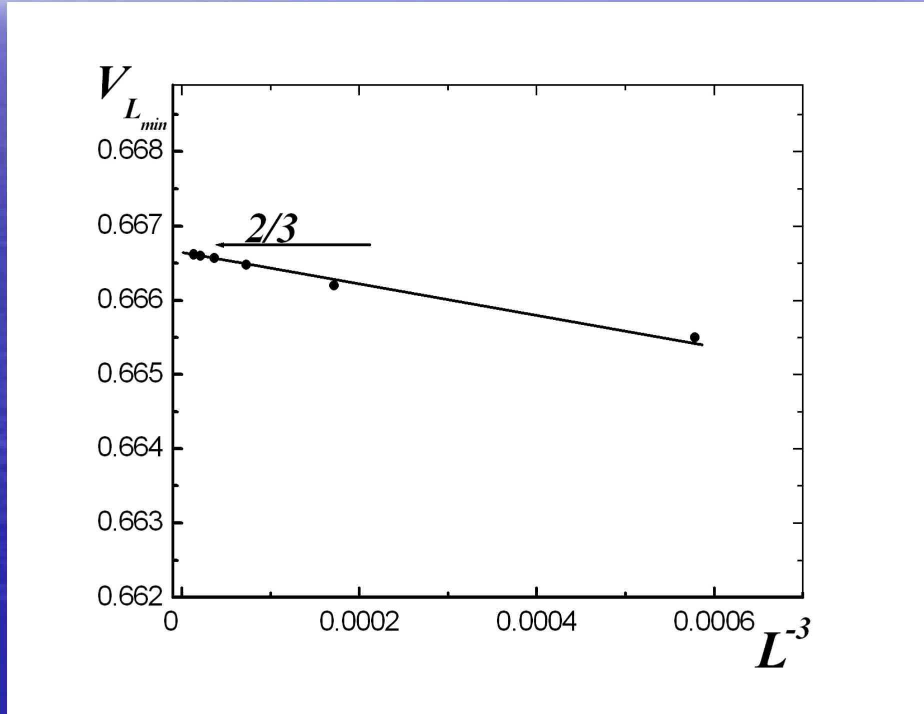
ФП первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями:

1. Величина V_L стремится к некоторому нетривиальному значению V* согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d}$$

при $L \to \infty$ и $T = T_N(L)$, где величина V^* отлична от 2/3.

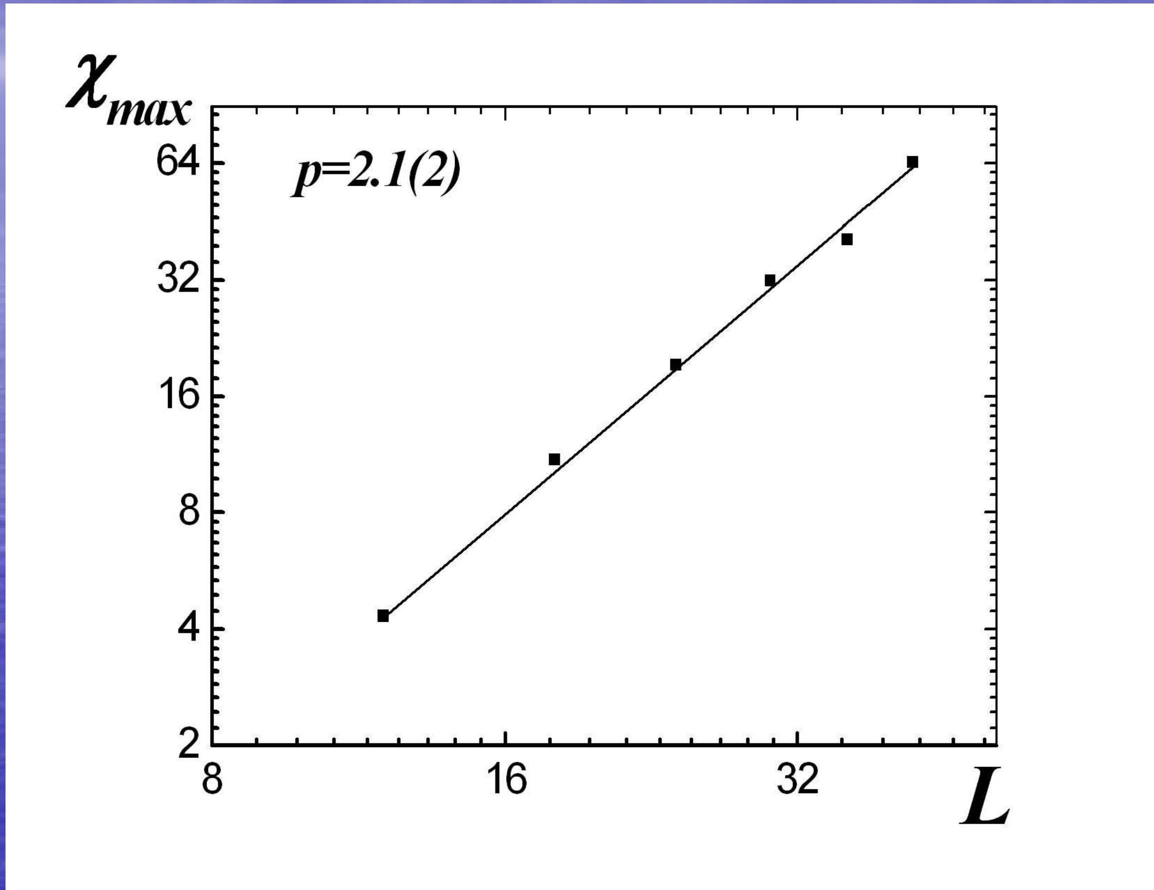




Зависимость энергетического кумулянта V_L от температуры $k_B T/|J|$.

Зависимость энергетического кумулянта $V_{L(min)}$ от L^{-3}.

2. Максимумы теплоемкости *C* и восприимчивости χ пропорциональны объему L^d, где *d* – размерность системы.



Зависимость максимума восприимчивости χ_{max} от *L*.

Анализ данных на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС)

$$F(T,L)=L^{-d}F(tL^{1/\nu}),$$

$$C(T,L)\sim L^{\alpha/\nu}C_0(tL^{1/\nu}),$$

$$\chi(T,L)\sim L^{\gamma/\nu}\chi_0(tL^{1/\nu}),$$

$$\frac{k_B T_C(L)}{J}=\frac{k_B T_C}{J}+\alpha L^{-1/\nu},$$

$$m(T,L)\sim L^{-\beta/\nu}m_0(tL^{1/\nu}),$$

$$V_i=\frac{\langle m^i E\rangle}{\langle m^i\rangle}-\langle E\rangle$$

L>>1, t<<1. $T=T_N$ →

$$C_{\max}=c_1+c_2L^{\alpha/\nu}$$

$$\ln\left(\chi/L^2\right)=c-\eta\ln L$$

$$m\sim L^{-\beta/\nu},\qquad \chi\sim L^{\gamma/\nu}$$

$$V_n=L^{1/\nu}g_{V_n}$$

$$g_{V_n}=Const$$

Анализ данных на основе теории (КРС)

$$m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}$$

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}$$

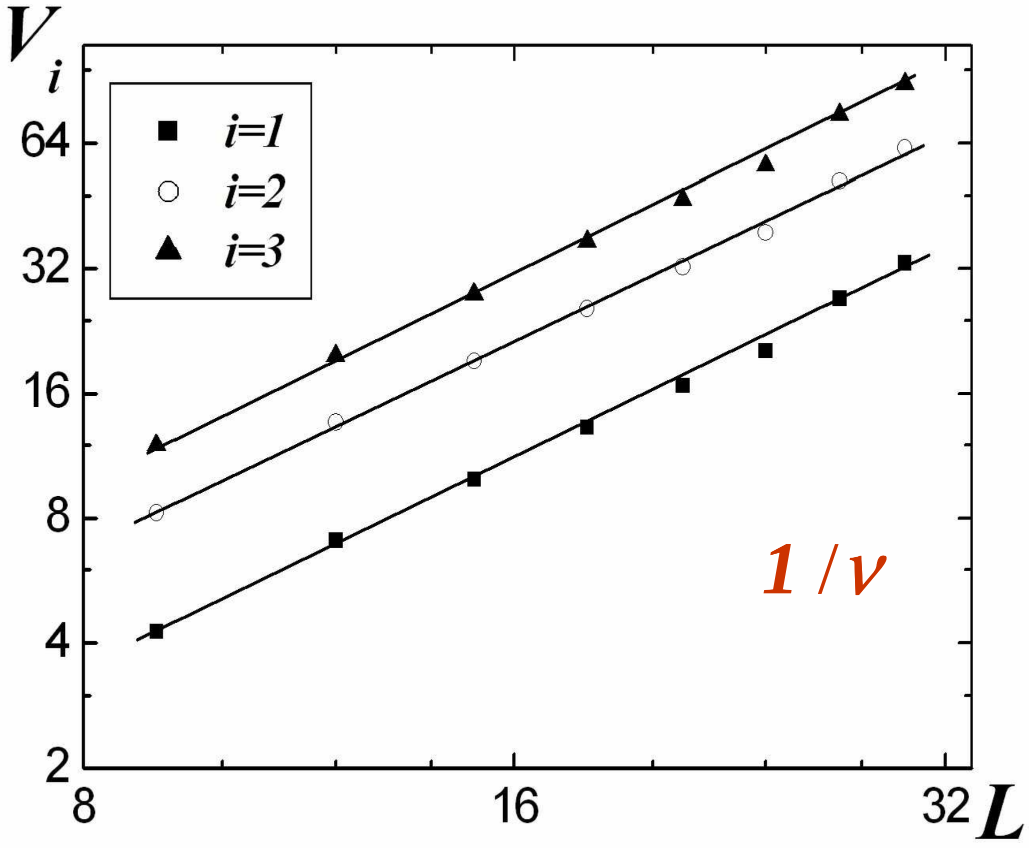
$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_n}$$

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k{}^i E \rangle}{\langle m_k{}^i \rangle} - \langle E \rangle$$

(i=1, 2, 3, 4).

Для определения киральных критических параметров

Зависимость параметра V_i от линейных размеров системы L при $T=T_N$.



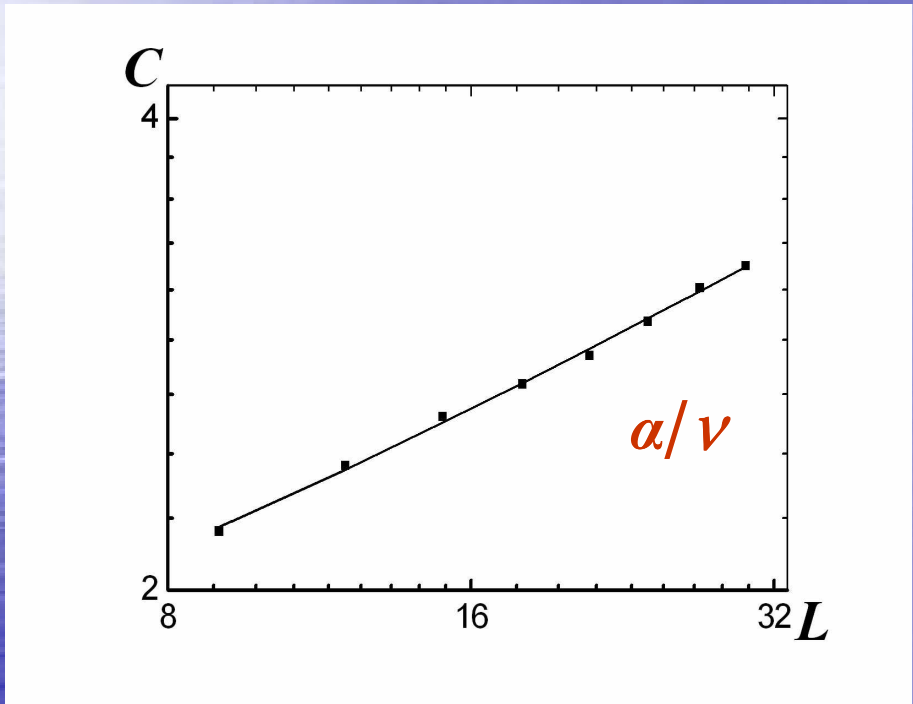
$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle$$

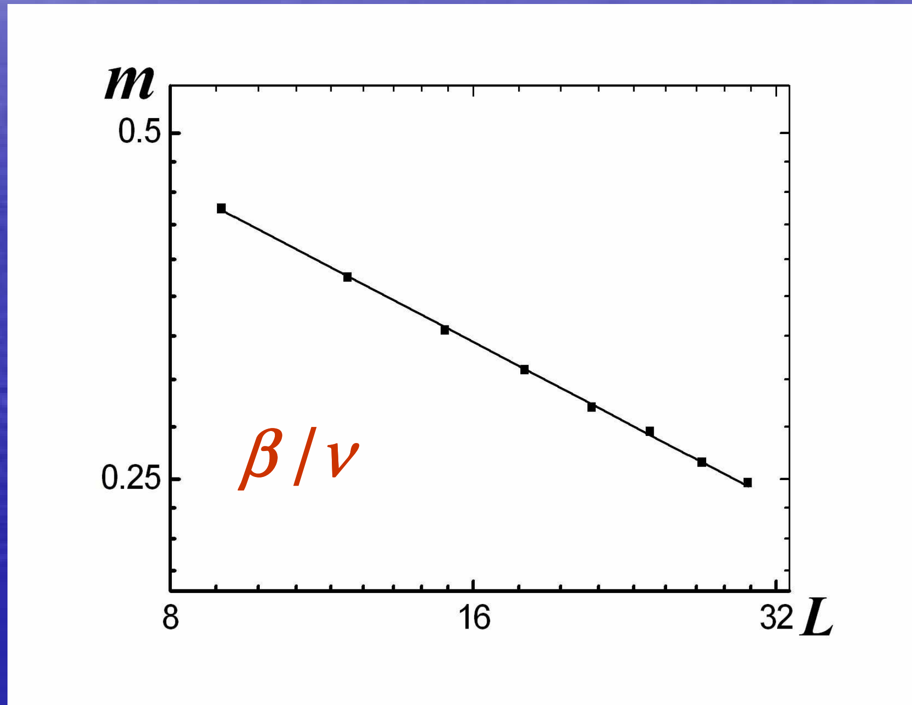
$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}$$

$$g_{V_n} = Const$$

$\nu = 0.65(1)$

Зависимость теплоемкости и магнитного параметра порядка от линейных размеров системы L при $T=T_N$.

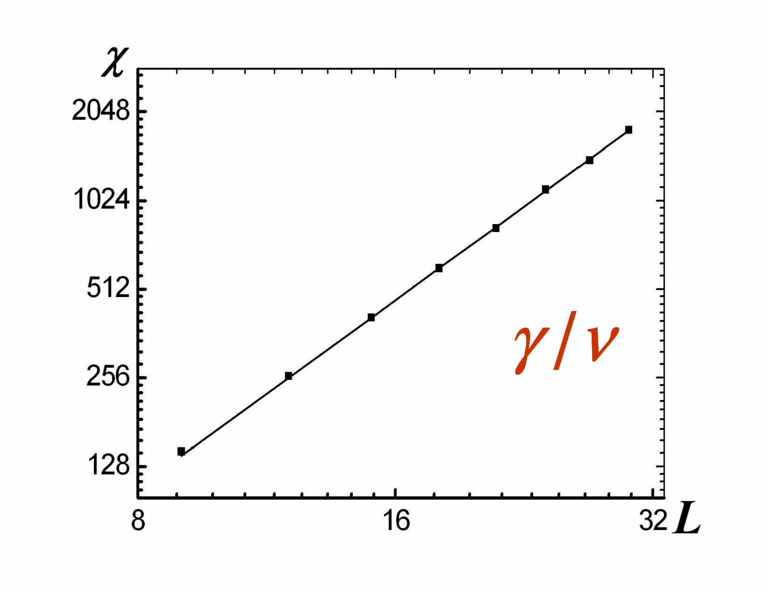


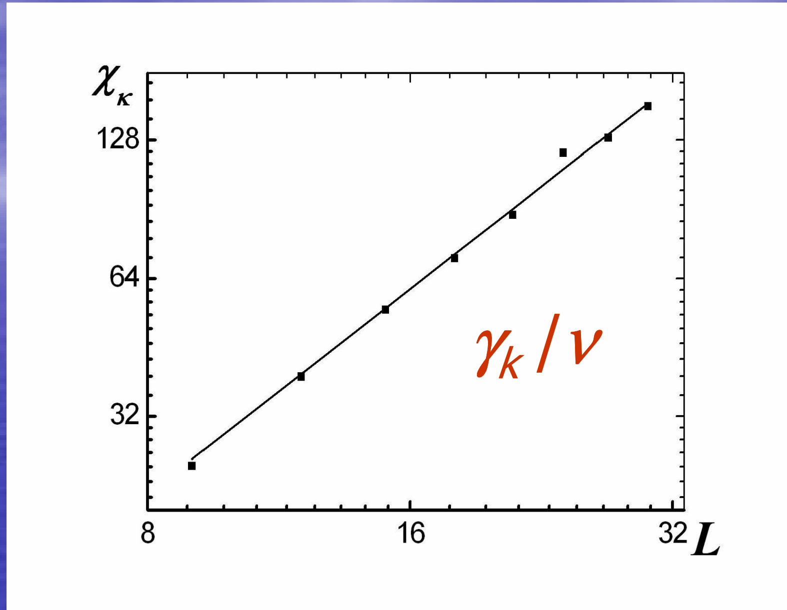


$\alpha=0.18(2)$

$\beta=0.30(2)$

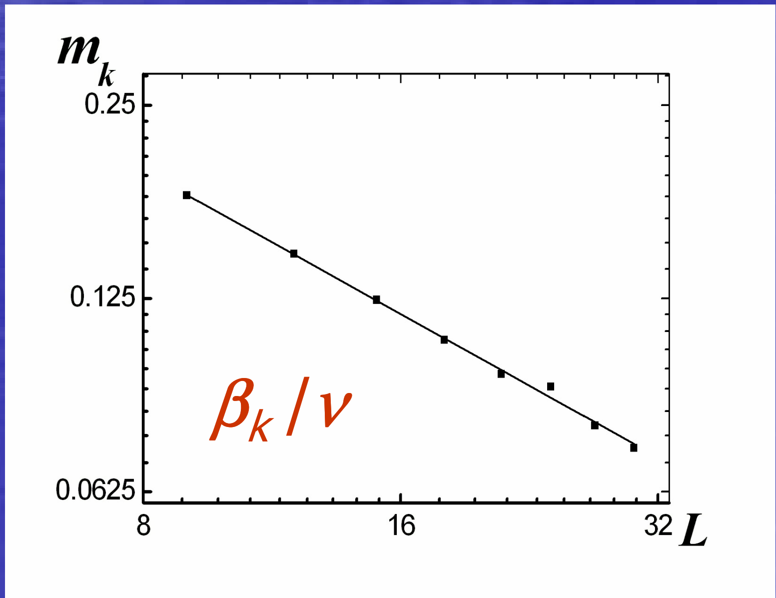
Зависимость восприимчивости и кирального параметра порядка от линейных размеров системы L при $T=T_N$.





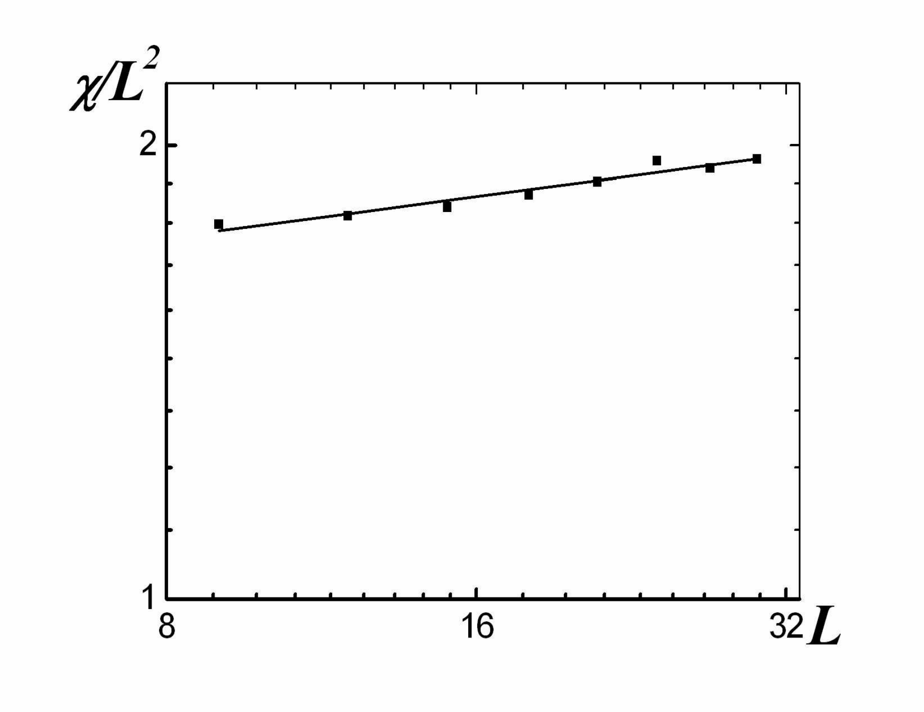
$\gamma=1.27(2)$

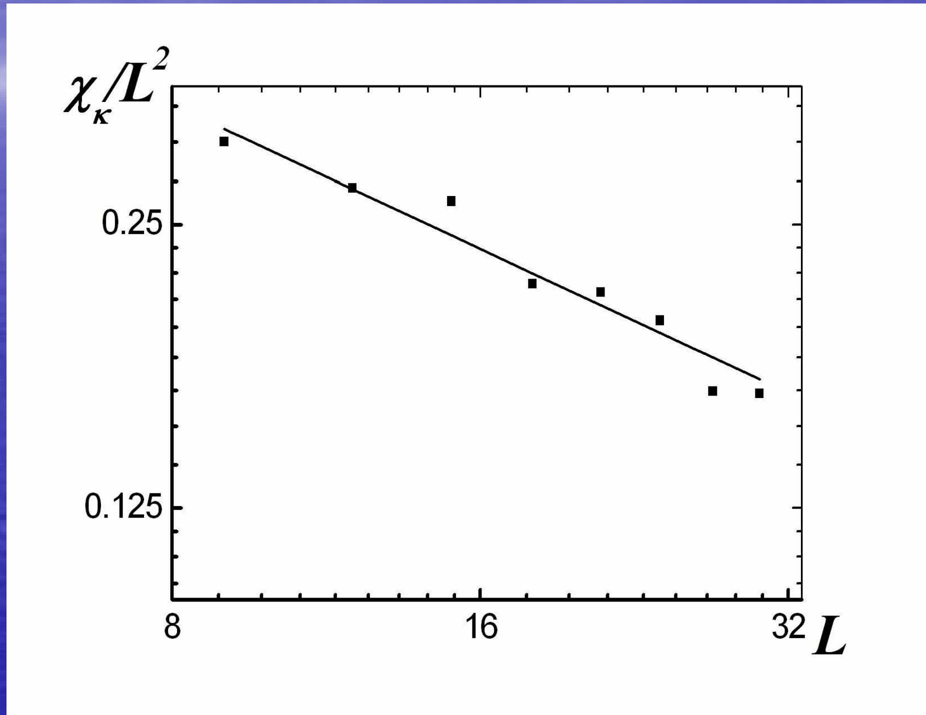
$\gamma_k=0.84(4)$



$\beta_k=0.53(2)$

Зависимость величины χ/L^2 от линейных размеров системы L при $T=T_N$.





η=-0.06(3)

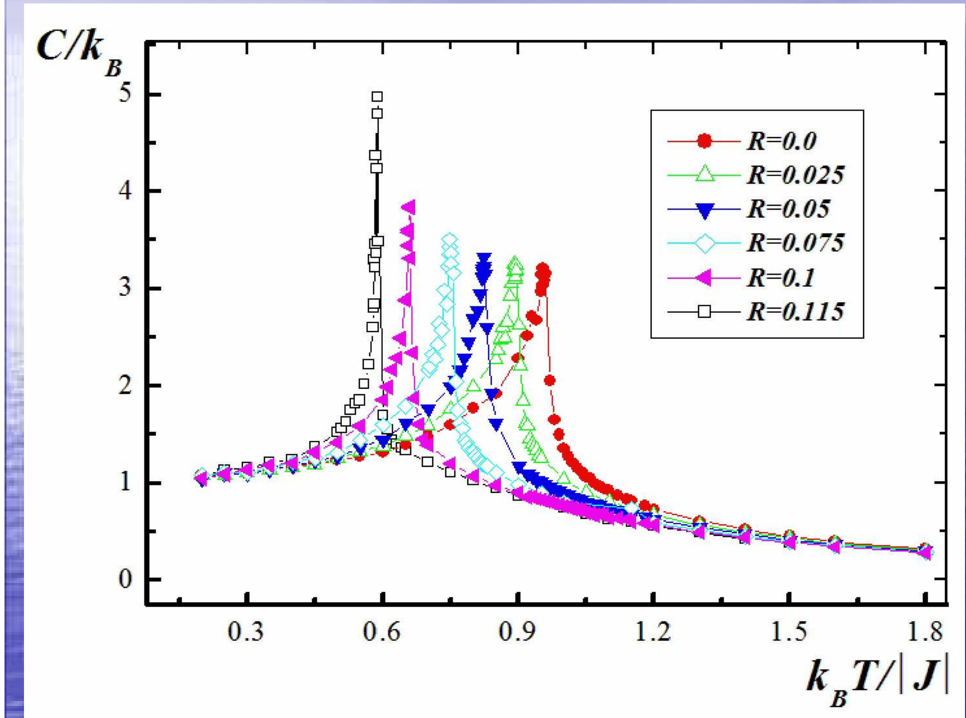
η_k=0.63(4)

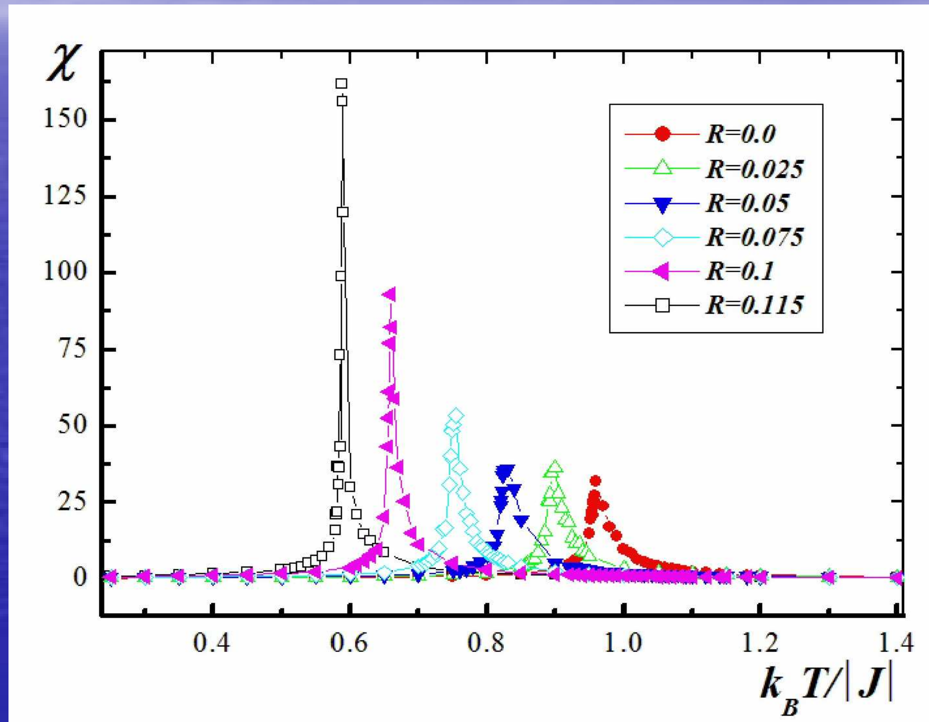
$$\ln\left(\chi / L^2\right) = c - \eta \ln L$$

Значения критических параметров для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

КП	Наши данные	Теория				Метод МК			Эксп-т	Чистая модель
T_N	0.957(1)	-	-	-	-	0.954(2)	0.955(2)	0.9577(2)	-	1.443
T_k	0.955(2)	-	-	-	-	-	0.958(2)	0.9577(2)	-	-
ν	0.65(1)	0.63	0.53	0.55	0.63(5)	0.53(3)	0.59(2)	0.586(8)	0.54(3)	0.7112(5)
α	0.18(2)	0.11	-	0.35	-	0.4(1)	0.24(8)	-	0.39(9)	-0.1336(1)
β	0.30(2)	0.31	0.28	0.30	-	0.25(2)	0.30(2)	0.285(11)	0.25(1)	0.3689(3)
γ	1.27(2)	1.26	1.03	1.06	1.20(8)	1.1(1)	1.17(7)	1.185(3)	1.10(5)	1.3960(9)
ν_k	0.65(2)	-	-	-	-	-	0.60(2)	0.60(2)	-	-
β_k	0.53(2)	-	-	-	-	-	0.55(2)	0.50(2)	0.44(2)	-
γ_k	0.84(4)	-	-	-	-	-	0.72(2)	0.82(2)	0.84(7)	-
η	-0.06(3)	0.0	0.072	0.08	0.08(3)	-	-	-	-	0.0375(5)
η_k	0.63(4)	-	-	-	-	-	-	-	-	-

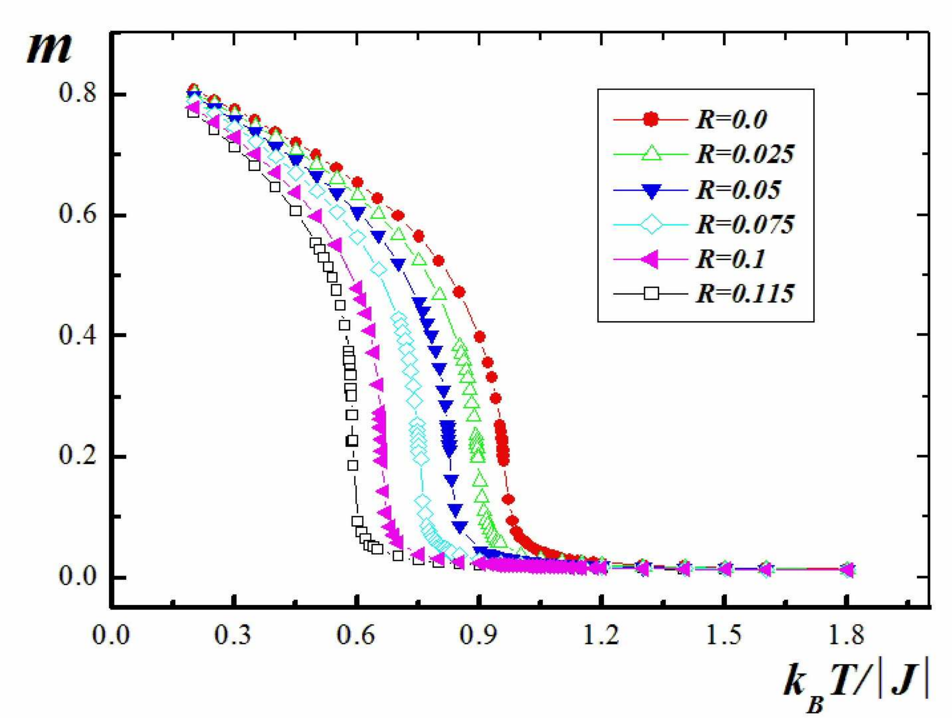
Зависимость теплоемкости и восприимчивости от температуры $k_B T/|J|$ для разных R.

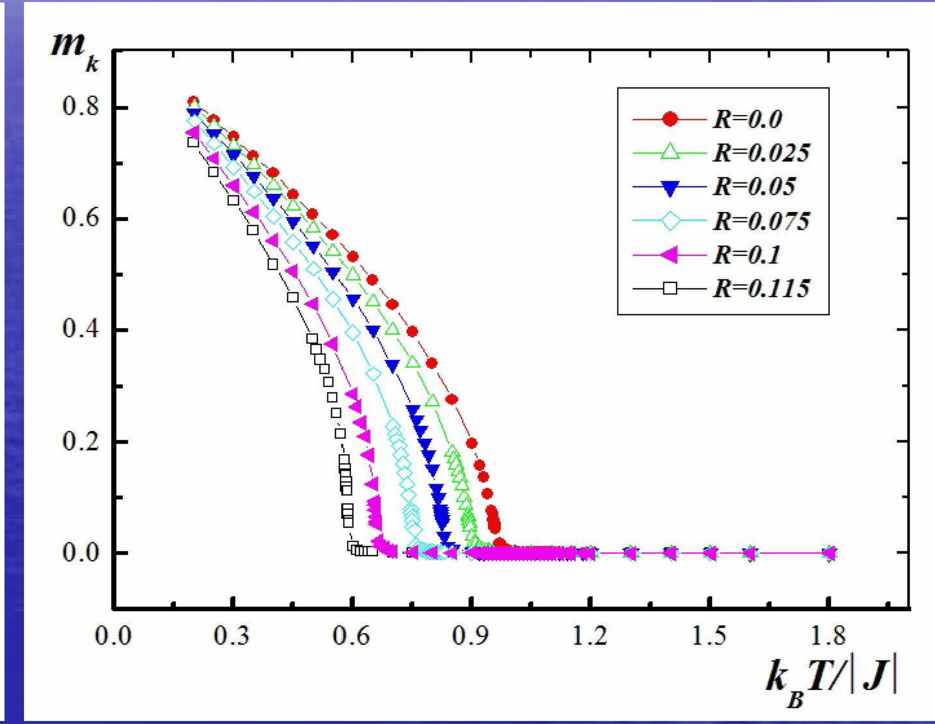




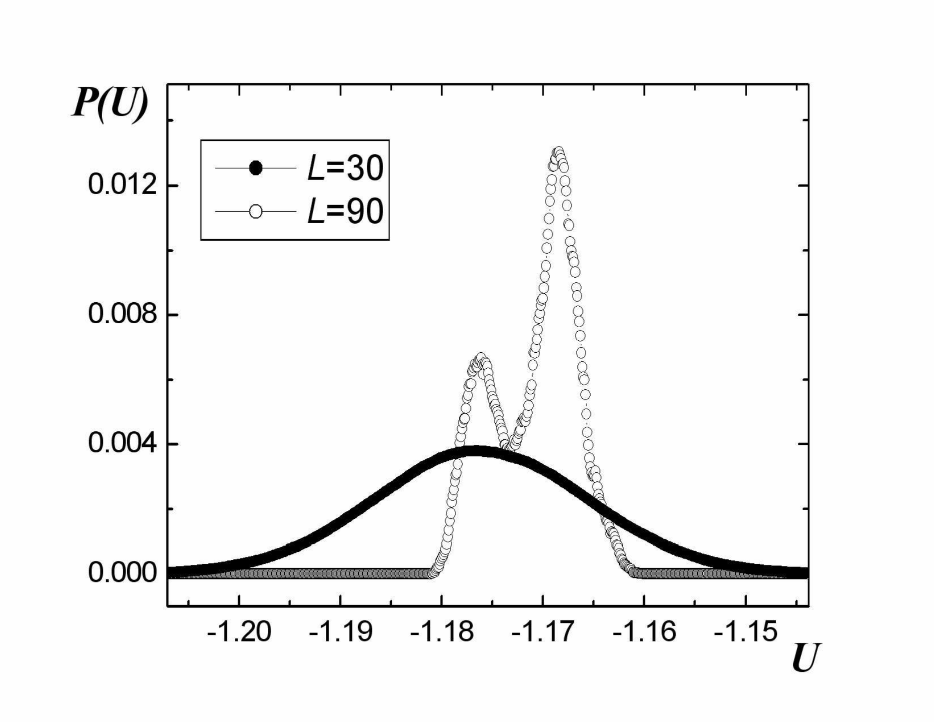
$R = {J'}/{J}$ – **величина взаимодействия вторых ближайших соседей**

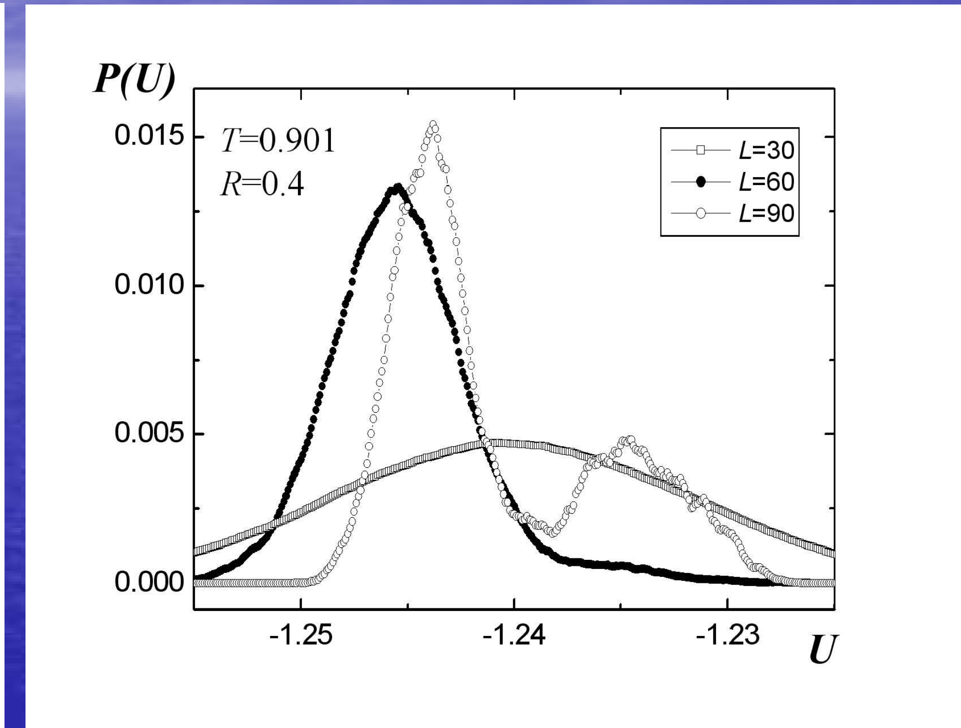
Зависимость магнитного и кирального параметра порядка от температуры $k_B T/|J|$ для разных R.





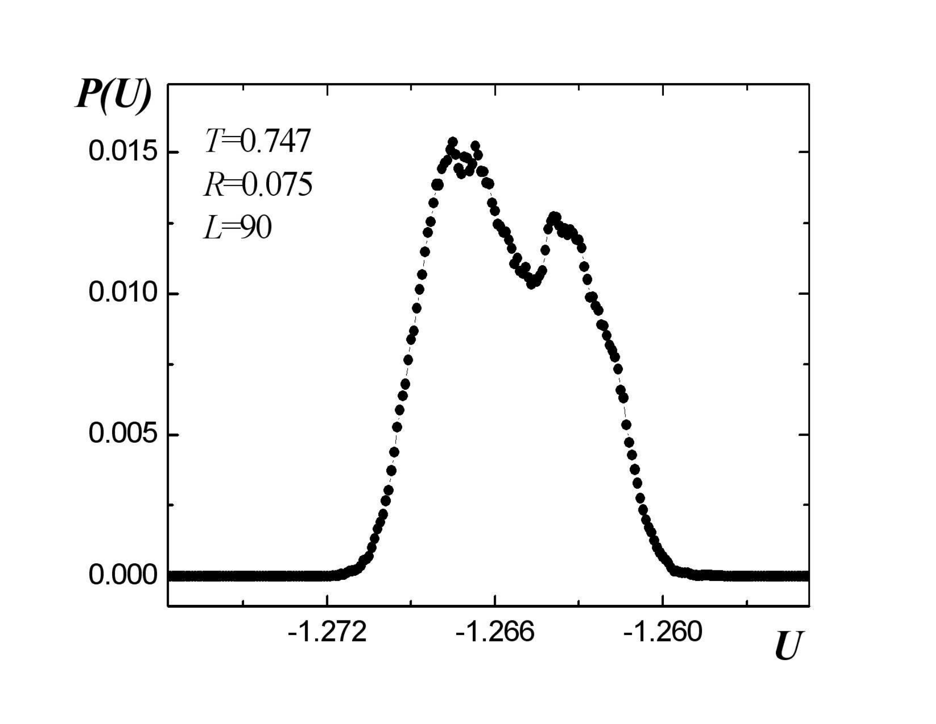
Энергетические гистограммы для *R*=0 и *R*=0.4

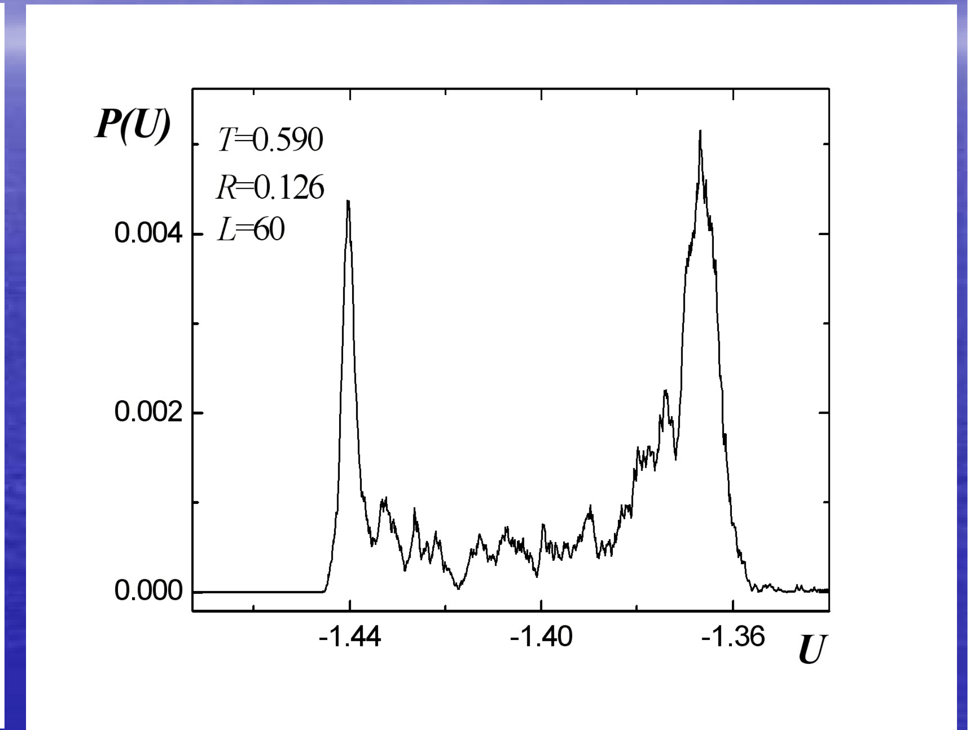




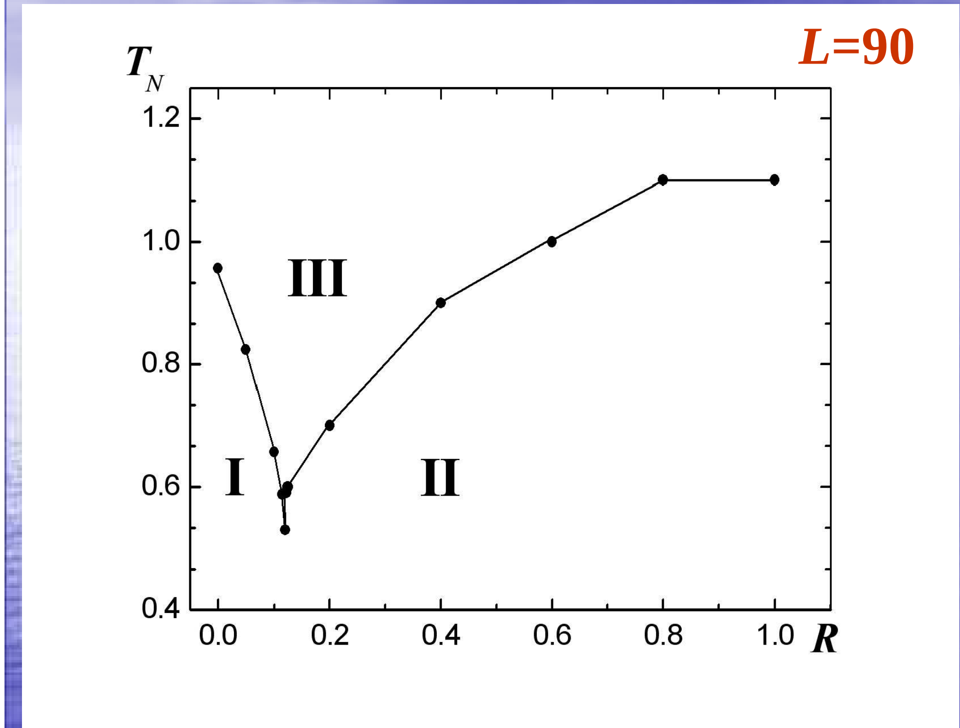
Наличие двойного максимума на энергетической гистограмме является достаточным условием для ФП первого рода

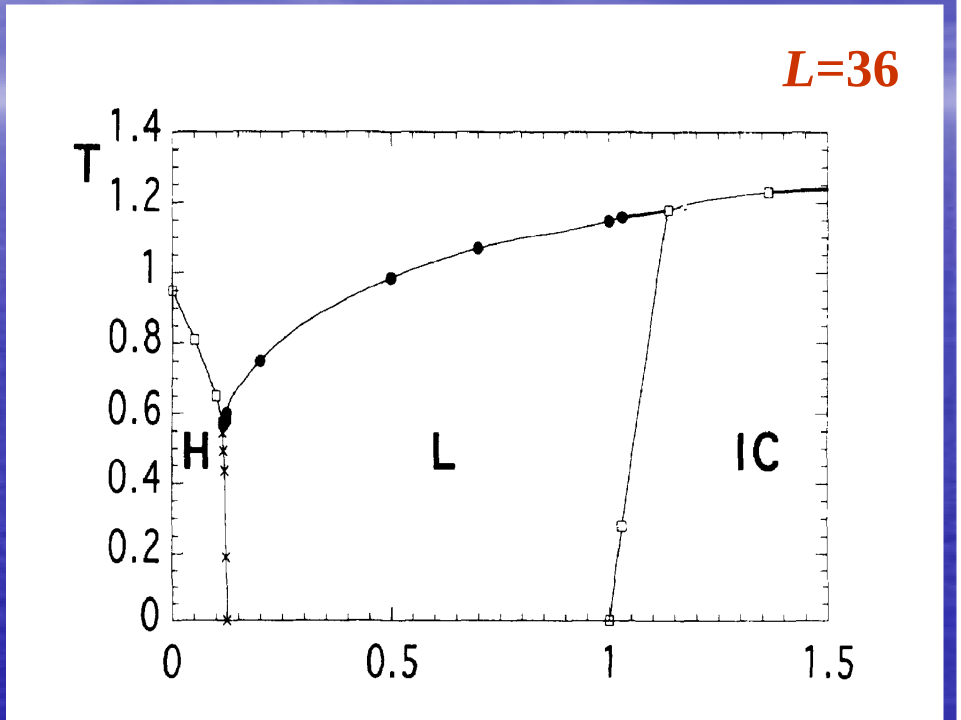
Энергетические гистограммы для *R*=0.075 и *R*=0.126





Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.





I – гелимагнитная (120^0 структура)
II – коллинеарная
III - парамагнитная.

D. Loison, and H.T. Diep, Phys. Rev. B 50, 16453 (1994).

ВЫВОДЫ:

1. **Показано, что в 3*d* фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке для решеток малого размера (L≤30) имеет место фазовый переход 2 рода и модель принадлежит к новому классу универсальности критического поведения.**

2. **Обнаружено, что в этой модели для решеток больших размеров (L≥90) имеет место фазовый переход 1 рода.**

3. **Установлено, что в интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей 0.0≤ *R* ≤1.0 в системе наблюдается фазовый переход 1 рода.**

СПАСИБО

ЗА ВНИМАНИЕ