

Статическое критическое поведение 3D-фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке

А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов

*Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
г. Махачкала, 367003, Республика Дагестан, Россия*

E-mail: m_akai@iwt.ru

Статья поступила в редакцию 7 сентября 2005 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования критических свойств 3D-фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. Используя теорию конечно-размерного скейлинга, рассчитаны магнитные и киральные критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , γ_k , намагниченности β , β_k и радиуса корреляции ν , ν_k . Показано, что 3D-фрустрированная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке образует новый класс универсальности критического поведения.

Методом Монте-Карло виконано дослідження критичних властивостей 3D-фрустрированої моделі Гейзенберга на шаруватій трикутній ґратці. Використовуючи теорію кінцево-розмірного скейлінга, розраховано магнітні й киральні критичні індекси теплоємності α , сприйнятливості γ , γ_k , намагніченості β , β_k і радіуса кореляції ν , ν_k . Показано, що 3D-фрустрирована модель Гейзенберга на шаруватій трикутній ґратці утворює новий клас універсальності критичного поведіння.

PACS: 05.70.Fh, 64.60.Cn, **75.10.-b**

Ключевые слова: фазовые переходы, фрустрация, метод Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг, киральность

1. Введение

Современная теория фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в основном базируется на идеях, заложенных в гипотезе скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы [1].

До недавнего времени казалось, что теория статических фазовых переходов и критических явлений в основном построена и практически прекратила свое развитие. Однако результаты, полученные, например, при исследовании фрустрированных систем (ФС), а также спиновых систем с замороженным немагнитным беспорядком, показывают, что многие из этих результатов выходят далеко за рамки современной теории ФП и КЯ [2].

Большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования таких систем сталкиваются с серьезными трудностями при

попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы их критического поведения [2,3]. Это привело к тому, что ФП и КЯ в таких системах интенсивно изучаются методами Монте-Карло (МК) [3–7].

Нами методом МК исследованы критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на 3D-треугольной слоистой решетке.

Интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, при изучении фрустрированных систем вопрос о существовании нового кирального класса универсальности на многих решетках, в частности треугольных, до сих пор является дискуссионным [4,5–7].

Во-вторых, многие важные физические свойства ФС сильно зависят от геометрии решетки (от степе-

ни фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, и этот вопрос еще недостаточно полно изучен.

В-третьих, первые попытки исследования этой модели предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода Монте-Карло не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

В работе [7] авторы обнаружили, что температуры магнитного и кирального упорядочения совпадают $T_N = T_k = 0,957(2)$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), но физические причины такого поведения им пока неизвестны. Кроме того, результаты исследований, полученные в работах [4–8], носят весьма противоречивый характер, что требует проведения дополнительных более точных исследований этой модели.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная 3D-модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке является фрустрированной магнитной системой.

Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде [5]:

$$\mathcal{H} = J \sum_{ij} S_i \cdot S_j + J' \sum_{ij} S_i \cdot S_j, \quad J > 0, \quad (1)$$

где S_i — трехкомпонентный единичный вектор, $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$, J и J' — константы обменного взаимодействия. Суммирование производится по ближайшим соседям. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует внутриплоскостное антиферромагнитное взаимодействие спинов, а второй — межплоскостное ферромагнитное. Фрустрации в этой модели обусловлены геометрией решетки [5,6,8].

Исследования магнитных и общетермодинамических свойств этой модели методом МК выполнены в работе [5]. В этой работе показано, что в такой системе наблюдается фазовый переход второго рода при $T_N = 0,954$, и рассчитаны некоторые магнитные статические критические индексы. Прямой анализ данных МК эксперимента и определения индексов через углы наклона зависимостей термодинамических параметров на графиках, построенных в логарифмическом масштабе, является малоубедительным, особенно при небольшой МК статистике, представленной в этой работе.

В более поздних работах [6–8] приведены значения магнитных и киральных критических индексов

$\alpha, \beta, \beta_k, \nu, \nu_k, \gamma$ и γ_k . Выбранный авторами способ использования конечно-размерного скейлинга для их расчета, на наш взгляд, не отличается высокой точностью.

Тем не менее данные этих работ свидетельствуют об отличии критических параметров фрустрированной 3D-модели Гейзенберга от значений, характеризующих класс универсальности чистой модели Гейзенберга.

Согласно представлениям современной теории ФП и КЯ, класс универсальности критического поведения зависит в основном от размерности пространства D ; числа степеней свободы параметра порядка n ; симметрии гамильтониана; радиуса характерного взаимодействия [1,9].

В то же время ряд имеющихся результатов говорит о том, что класс универсальности ФС может зависеть не только от этих параметров. Об этом также свидетельствуют и результаты, полученные методом МК на решетках разной геометрии [4,5–7]. Отметим, что асимптотические значения критических параметров таких систем известны с недостаточной точностью.

С учетом всего этого в данной работе нами принята попытка по возможности с максимальной точностью, с соблюдением единой методики, с использованием надежной и проверенной схемы определить значения критических параметров 3D-фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Фрустрированные спиновые системы — довольно сложные объекты для исследования даже методом Монте-Карло. Как известно, вблизи критической точки метод МК сталкивается с проблемой «критического замедления», а в фрустрированных системах эта проблема становится еще более актуальной. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Из них наиболее мощными и эффективными в исследовании КЯ в различных спиновых системах и моделях оказались кластерные алгоритмы метода МК [10–13]. Эти алгоритмы на сегодняшний день позволили с высокой степенью точности рассчитать критические параметры многих модельных систем [3]. Но, к сожалению, применение этих алгоритмов к исследованию КЯ в фрустрированных системах оказалось малоэффективным. Это обусловлено тем, что ФС испытывают фазовый переход при низких температурах и/или формируемый кластер охватывает слишком большую область системы. Иногда эти алгоритмы используют с некоторым подбираемым параметром, который позволяет регулировать размер формируемого кластера. Поэтому для изучения ФС стали применять специальные ва-

рианты кластерных алгоритмов, которые оказались эффективными только для исследования низкоразмерных моделей ФС [14,15]. При исследовании трехмерных моделей эти алгоритмы даже менее эффективны, чем стандартный алгоритм Метрополиса (см. ссылки в [16]).

Поэтому в данном исследовании нами использован классический алгоритм Метрополиса [17]. Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 9-30$. Число спинов N в моделируемых системах составляло 729; 1728; 3375; 5832; 9261; 13824; 19683 и 27000. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси z . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $4,0 \cdot 10^5$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной до 10^6 МКшагов/спин.

3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использованы выражения [7,18-20]

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (2)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle |m|^2 \rangle), & T < T_N \\ (NK)\langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases} \quad (3)$$

$$\chi_k = \begin{cases} (NK)(\langle k^2 \rangle - \langle |k|^2 \rangle), & T < T_k \\ (NK)\langle k^2 \rangle, & T \geq T_k \end{cases}, \quad (4)$$

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, U — внутренняя энергия, m — магнитный параметр порядка, k — киральный параметр порядка, χ_k — киральная восприимчивость.

Параметр порядка системы m вычисляли по формуле [5]

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle} / 3, \quad (5)$$

где M_A , M_B и M_C — намагниченности трех подрешеток.

Намагниченность подрешетки вычисляли по следующей формуле [5]:

$$\langle |M_r| \rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, \quad r = A, B, C. \quad (6)$$

Наряду с вектором антиферромагнетизма критической величиной является спиновая киральность, флуктуации которой определяются новыми критическими индексами β_k , γ_k и ν_k [5-8].

Для вычисления кирального параметра порядка системы k использованы следующие выражения [6,7]:

$$k_p = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{ij} [S_i \times S_j]_p, \quad (7)$$

$$k = \frac{1}{N} \sum_p k_p, \quad (8)$$

где $p = (x, y, z)$ — компоненты вектора.

На рис. 1 представлены характерные зависимости магнитного m и кирального k параметров порядка от температуры для системы с линейными размерами $L = 30$. Отметим, что в широкой области низких температур температурные зависимости магнитного и кирального параметров порядка сильно различаются. Из графика видно, что в критической области эта зависимость имеет одинаковый характер. Это говорит о том, что температуры фазового перехода для магнитного и кирального параметров порядка совпадают или очень близки.

Для более точного определения критической температуры T_N нами использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка. Кумулянт Биндера четвертого порядка имеет вид [21]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (9)$$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых U_L в их тем-

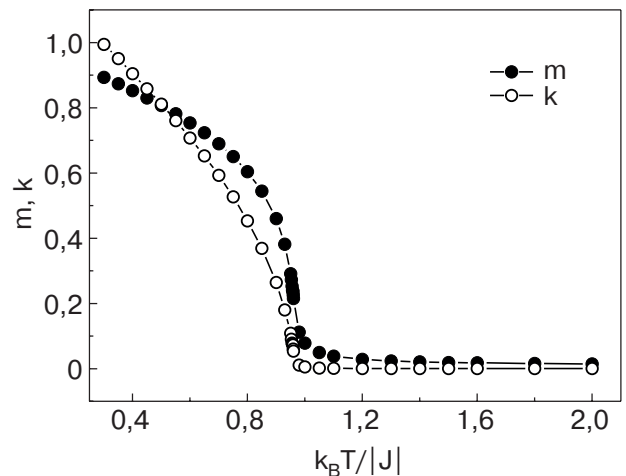


Рис. 1. Зависимость магнитного и кирального параметров порядка от температуры $k_B T/|J|$.

пературной зависимости является критической точкой [20].

На рис. 2 представлена характерная зависимость U_L от температуры для магнитного параметра порядка. Из графика видно, что критическая температура $T_N = 0,957(2)$. Для определения киральной критической температуры T_k использован метод пересечения кумулянтов («cumulant crossing») [7,22,23]. Согласно этому методу, зависимости $U_L(T)$ для систем разных размеров строятся в приведенных масштабах $\ln^{-1}(L'/L)$, где L' и L – размеры двух систем, причем $L' > L$. Экстраполяция температуры при $\ln^{-1}(L'/L) \rightarrow 0$ соответствует критической температуре для бесконечной системы $T_k(L \rightarrow \infty)$. На рис. 3 представлена характерная зависимость температуры T_k от величины $\ln^{-1}(L'/L)$ для разных L . Как следует из графика, все данные для разных L ложатся на прямые, которые при $\ln^{-1}(L'/L) \rightarrow 0$ сходятся к одной точке. Эта точка соответствует значению киральной критической температуры $T_k = 0,955(2)$, которая совпадает со значением магнитной критической температуры $T_N = 0,957(2)$. Об этом свидетельствуют и результаты работ [5,7].

Для расчета статических киральных и магнитных критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , γ_k , намагниченности β , β_k и радиуса корреляции ν , ν_k использованы соотношения теории конечно-размерного скейлинга [4,19,22–25].

Из соотношений КРС следует, что для системы с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L справедливы следующие зависимости [3,4,7,19,24–27]:

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (10)$$

$$k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}, \quad (11)$$

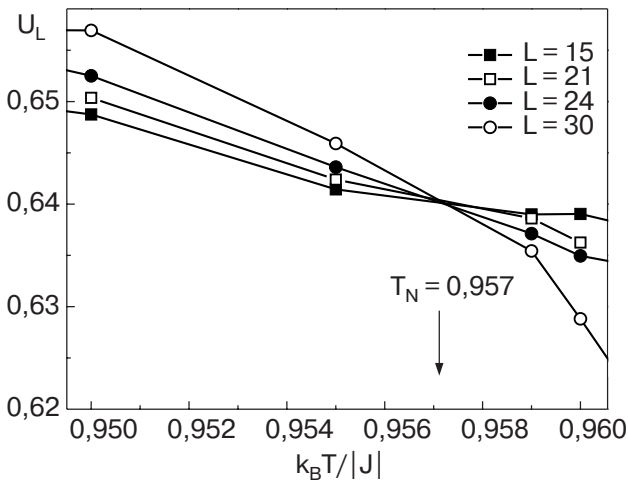


Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J|$.

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (12)$$

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}, \quad (13)$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (14)$$

$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_{nk}}, \quad (15)$$

где g_{V_n} – некоторая постоянная, а в качестве V_n и V_{nk} могут выступать:

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - E, \quad (i = 1, 2, 3, 4), \quad (16)$$

$$V_{k_i} = \frac{\langle k^i E \rangle}{\langle k^i \rangle} - E, \quad (i = 1, 2, 3, 4). \quad (17)$$

Эти выражения были нами использованы для определения β , β_k , γ , γ_k , ν и ν_k . Аналогичное выражение для теплоемкости, как уже показано в [28,29], не работает, и для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используют выражение [5–7]

$$C_{\max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \quad (18)$$

где A_1 и A_2 – некоторые коэффициенты.

На рис. 4 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость магнитного параметра порядка m от линейных размеров решетки L . Как видно на рисунке, все данные ложатся на прямую, угол ее наклона определяет значение β/ν . По этой схеме нами определены значения α/ν , β_k/ν_k ,

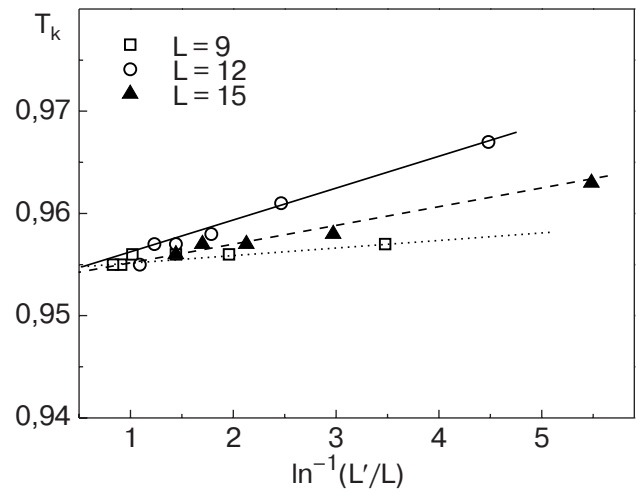


Рис. 3. Зависимость температуры T_k от $\ln^{-1}(L'/L)$ для разных L .

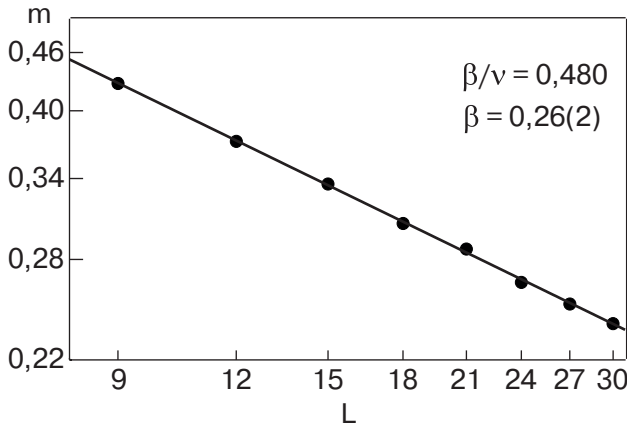


Рис. 4. Зависимость магнитного параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$.

γ/v , γ_k/v_k , $1/v$ и $1/v_k$. Затем полученные значения v и v_k использованы для расчета α , β , β_k , γ и γ_k . Все значения индексов, полученные таким образом, представлены в таблице. Здесь же для сравнения приведены данные, полученные в работах [5–7], и экспериментальные данные (см. ссылки в [8]).

Таблица. Значения критических параметров для модели Гейзенберга

Критические параметры									Ссылка
T_N	T_k	v	α	β	γ	v_k	β_k	γ_k	
0,957(2)	0,955(2)	0,53(2)	0,37(2)	0,26(2)	1,11(2)	0,60(2)	0,45(2)	0,93(2)	Настоящая работа
0,954	–	0,53(3)	0,4(1)	0,25(2)	1,1(1)	–	–	–	[5]
0,955(2)	0,958(2)	0,59(2)	0,24(8)	0,30(2)	1,17(7)	0,60(2)	0,55(2)	0,72(2)	[6]
0,9577(2)	0,9577(2)	0,586(8)	–	0,285(11)	1,185(3)	0,60(2)	0,50(2)	0,82(2)	[7]
–	–	0,54(3)	0,39(9)	0,25(1)	1,10(5)	–	0,44(2)	0,84(7)	Эксперимент (см. в [8])
1,443	–	0,706	–0,117	0,366	1,386	–	–	–	Чистая модель [3]

Отметим, что значение индекса v , найденное нами, в пределах погрешности совпадает с полученным в работе [5], но отличается от значений работ [6,7]. А значения индекса v_k совпадают с полученными в работах [6,7]. Результаты нашей работы показывают, что $v \neq v_k$. Индексы α , β и γ отличаются от данных авторов [6,7], но в пределах погрешности совпадают с результатами работы [5]. Индексы β_k и γ_k близки к полученным в работе [7], но отличаются от данных, приведенных в [6]. Киральные и магнитные критические индексы, полученные в данной работе, не совпадают. Критическая температура $T_N = 0,957(2)$ и $T_k = 0,955(2)$, определенная в данном исследовании и в работах [5–7], практически совпа-

дают. Как видно из таблицы, результаты нашей работы хорошо согласуются как с данными лабораторного эксперимента, так и с большинством результатов численных экспериментов других авторов.

4. Заключение

Наши исследования критических свойств 3D-фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке, выполненные с использованием классического алгоритма метода Монте-Карло (алгоритм Метрополиса), позволили рассчитать все основные статические магнитные и киральные критические индексы. Расчет критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , γ_k , параметров порядка β , β_k и радиуса корреляции v , v_k выполнен на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга и с соблюдением единой методики в рамках одного исследования. Полученные данные свидетельствуют о принадлежности 3D-фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной слоистой решетке к новому киральному классу универсальности.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 04–02–16487), грантом ведущей научной школы (НШ–2253.2003.2), и грантом Фонда содействия отечественной науке (А.К. Муртазаев).

1. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
2. Вик. С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
3. И.К. Камиллов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев, *УФН* **169**, 773 (1999).
4. Д. Лойсон, А.И. Соколов, Б. Деламотт, С.А. Антоненко, К.Д. Шотт, Х.Т. Дип, *Письма ЖЭТФ* **72**, 447 (2000).

5. H.J. Kavamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 474 (1987).
6. H.J. Kavamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 1299 (1992).
7. A. Mailhot, M.L. Plumer, and A. Caille, *Phys. Rev.* **B50**, 6854 (1994).
8. С.В. Малеев, *УФН* **172**, 617 (2002).
9. И.К. Камилов, Х.К. Алиев, *Статические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах*, Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).
10. U. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
11. U. Wolf, *Nucl. Phys.* **B322**, 759 (1989).
12. A.M. Ferrenberg and R.N. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
13. A.M. Ferrenberg and R.N. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
14. D. Kandel, R. Ben-Av, and E. Domany, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 941 (1990).
15. D. Kandel, R. Ben-Av, and E. Domany, *Phys. Rev.* **B45**, 4700 (1992).
16. P.D. Coddington and L. Hang, *cond-mat/9402030* V1 (1994).
17. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
18. K. Binder and J.-Sh. Wang, *J. Stat. Phys.* **55**, 87 (1989).
19. P. Peczak, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).
20. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
21. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
22. K. Binder, *Z. Phys.* **B43**, 119 (1981).
23. A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B44**, 5081 (1991).
24. E. Ferdinand and M.E. Fisher, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
25. M.E. Fisher and M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
26. D.P. Landau, *Physica* **A205**, 41, (1994).
27. D. Loison, *Phys. Lett. A* **257**, 83 (1999).
28. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.А. Магомедов, *ЖЭТФ* **120**, 1535 (2001).
29. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов, *ФТТ* **47**, 1125 (2005).

The static critical behavior of a 3D- frustrated Heisenberg model on a layered triangular lattice

A.K. Murtazaev, J.K. Kamilov, and M.K. Ramazanov

The critical properties of a three-dimensional frustrated Heisenberg model on a layered triangular lattice are investigated by the Monte Carlo method. On the basis of the finite size scaling theory the magnetic and chiral critical exponents of heat capacity α , susceptibility γ , γ_k , magnetization β , β_k , and correlation length ν , ν_k are calculated. It is shown that the three-dimensional frustrated Heisenberg model on the layered triangular lattice forms a new universality class of the critical behavior.

Keywords: phase transitions, frustration, Monte-Karlo method, finite-size scaling, chirality