

Исследование анизотропной модели Изинга методом Монте-Карло

А.К. Муртазаев, Ж.Г. Ибаев

*Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН
ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия
E-mail: ibaev77@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 24 марта 2009 г.

Методом Монте-Карло исследованы длиннопериодические модулированные структуры в анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (ANNNI-модель). Установлены характер, особенности и зависимость модулированных структур от температуры и отношения констант обменного взаимодействия между ближайшими и последующими соседями. Построена фазовая диаграмма.

Методом Монте-Карло досліджено довгоперіодичні модульовані структури в анізотропній моделі Ізінга з конкуруючими взаємодіями (ANNNI-модель). Встановлено характер, особливості та залежність модульованих структур від температури й відношення констант обмінної взаємодії між найближчими та наступними сусідами. Побудовано фазову діаграму.

PACS: **75.10.–Hk** Классические спиновые модели;
75.20.–g Диамагнетизм, парамагнетизм и суперпарамагнетизм;
75.30.–Gw Магнитная анизотропия;
75.40.–Mg Численное моделирование в исследованиях.

Ключевые слова: ANNNI-модель, метод Монте-Карло, модулированные структуры, модель Изинга.

1. Введение

Первая модулированная магнитная структура, простая спираль, была открыта в $MnAu_2$ в 1962 году [1]. Начало теоретическим исследованиям несоизмеренных фаз в кристаллах с помощью длиннопериодических модулированных структур положено в работах Дзялошинского [2]. Одна из особенностей рассматриваемых структур — наличие на фазовых диаграммах состояний вещества с такими структурами трикритической точки Лифшица, существование которой предсказано в работе [3]. В точке Лифшица пересекаются линии, разделяющие симметричную, несимметричную и несоизмеренную фазы.

Исследования модулированных структур, продолжающееся уже почти полвека, не дают четкого ответа на многие вопросы, связанные с особенностями их термодинамического поведения. Например, не установлена зависимость волнового числа от температуры и других микроскопических и макроскопических параметров. Исследования, проведенные с помощью различных теоретических методов, хотя и позволили

понять некоторые особенности поведения указанных выше параметров, до сих пор не могут дать ясной и цельной картины поведения систем, в которых наблюдаются различные модулированные структуры [4–10].

В последнее время для изучения сложных магнитных систем часто применяются методы Монте-Карло [11]. Эти методы широко используются не только при исследовании общих термодинамических свойств различных модельных систем, но и стали одним из основных и эффективных методов исследования критических свойств любых сложных систем [12]. Эффективность этих методов в настоящее время успешно подтверждена результатами исследования магнитных сверхрешеток, примесных систем, сложных систем с фрустрациями [13,14] и т.д.

2. Модель

Для исследования длиннопериодических модулированных структур может быть использована модификация классической модели Изинга, учитывающая

конкурирующие взаимодействия соседей, следующих за ближайшими по направлению оси Z (ANNNI-модель). Это наиболее простая и универсальная модель статистической физики, применяемая для качественного объяснения поведения и свойств длиннопериодических модулированных структур, наблюдаемых в магнитных материалах.

ANNNI-модель была впервые введена в 1961 г. для описания магнитной структуры в Er [15]. В последующем модель использовалась многими авторами для изучения модулированных структур в CeSu , MnP [16,17] и в других соединениях.

Модель схематически представлена на рис. 1. Спины принимают значения $S = \pm 1$ и ферромагнитным образом взаимодействуют с ближайшими соседями. В направлении оси Z имеется антиферромагнитное взаимодействие со вторыми соседями.

Гамильтониан рассматриваемой модели можно представить в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_1 \sum_i S_i S_{i+1}, \quad (1)$$

где $J > 0$ — параметр ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей, $J_1 < 0$ — параметр антиферромагнитного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими по направлению оси Z.

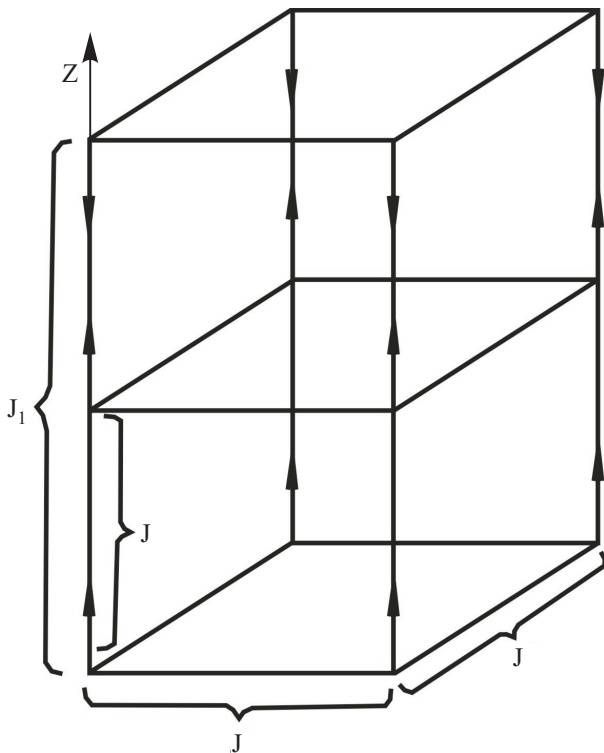


Рис. 1. Модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями.

Для изучения рассматриваемой модели применялись методы ренормализационной группы и ϵ -разложения [4], теория среднего поля [5], высоко- и низкотемпературные разложения [6], а также гипотеза подобия (скейлинг) [7] и методы Монте-Карло [8–10,16].

С помощью теории среднего поля, высоко- и низкотемпературных разложений удалось рассчитать фазовую диаграмму (рис. 2). Несмотря на простоту модели, фазовая диаграмма очень информативна и демонстрирует наличие в рассматриваемой модели как обычных фазовых переходов второго рода, так и переходов с образованием длиннопериодических модулированных структур. По фазовой диаграмме легко определить основное состояние модели. Если выполняется соотношение $2J_1 + J > 0$, то основное состояние модели — ферромагнитное. Если $2J_1 + J < 0$, то основное состояние представляет собой антиферромагнитную структуру с чередующимися парными слоями, направленными «вверх» и «вниз», и с волновым числом $q = 1/4$. Если $2J_1 + J = 0$, то основное состояние представляет собой последовательность доменов вверх и вниз. При некотором соотношении $2J_1 + J$ на фазовой диаграмме существует точка Лифшица (на рис. 2 обозначена буквой P), где сосуществуют парамагнитная, ферромагнитная и модулированная фазы.

Отметим, что на рассматриваемой фазовой диаграмме с помощью упомянутых выше методов удалось лишь приблизительно установить расположение линии, разделяющей переходы в парамагнитную фазу, а линии переходов «ферромагнетик–модулированная фаза» и между различными модулированными фазами проведены условно [17]. В связи с этим очевидно, что необходимы более строгие исследования этой модели.

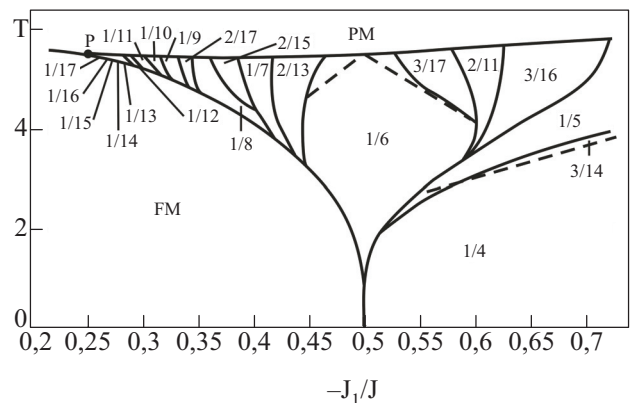


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями. (Диаграмма построена по данным теории среднего поля [16], P — точка Лифшица, дробные числа на графике указывают значения волновых чисел модулированных структур.) Температура T на рисунках дана в единицах J/k_B .

3. Результаты исследования и их обсуждение

Методом Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса [18] нами исследована ANNNI-модель. Изучены системы кубической формы с периодическими граничными условиями и размерами $L \times L \times L$; $8 \leq L \leq 64$. Число спинов в моделируемых системах составляло $512 \leq N_{\text{eff}} \leq 262144$. На ЭВМ генерировались марковские цепи длиной $\tau = 100\tau_0$ ($\tau_0 = 10^4$ МК-шагов/спин — длина неравновесного участка). Усреднением вдоль этой цепи вычислены термодинамические параметры системы. Кроме того, выполнено усреднение по трем различным начальным конфигурациям. При этом погрешность полученных результатов не превышает размеры используемых на рисунках символов.

Для исследования зависимости намагниченности вдоль оси Z использована величина

$$M_Z = \frac{1}{L^2} \sum_{x,y} S_{x,y,z}, \quad (2)$$

представляющая собой усредненную намагниченность слоя, перпендикулярного оси Z .

Отметим, что в такого рода исследованиях число модулированных структур, наблюдаемых в системе, растет с увеличением линейных размеров. Например, для малых систем с трудом удается обнаружить отчетливые модулированные структуры, тогда как для самой большой системы с $L = 64$ такие фазы легко наблюдаются. Поэтому все результаты, представленные в данной работе, относятся к системе с наибольшими линейными размерами $L = 64$.

Обратим внимание, что при $|J_1/J| < 0,25$ никаких модулированных структур в системе не возникает и с повышением температуры происходит обычный фазовый переход второго рода «ферромагнетик–парамагнетик». При $|J_1/J| \geq 0,25$ в системе обнаруживаются фазовые переходы «ферромагнетик–модулированная фаза–парамагнетик». В данной работе основное внимание уделено особенностям длиннопериодических модулированных структур.

Значения волнового числа и характер амплитудной и фазовой модуляции можно определить с помощью математического аппарата спектрального анализа, основанного на преобразованиях Фурье [15]:

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

где

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

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

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

$$q = k/L, \quad (7)$$

k — номер гармоники.

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

Для определения зависимости параметров модулированных структур от температуры и отношения констант обменного взаимодействия рассмотрим структуры при фиксированных значениях этих макроскопических параметров. Нужно заметить, что поведение модулированных структур зависит от рассматриваемой области изменения температуры и отношения констант взаимодействия.

На рис. 3 представлены некоторые равновесные конфигурации намагниченности слоя и соответствующие амплитуды фурье-преобразований для различных температур T (температура дана в единицах J/k_B) при $|J_1/J| = 0,55$. Видно, что длина волны модулированных структур увеличивается с увеличением температуры от 4 до 6 единиц интервала периодичности решетки. При этом среднее значение намагниченности M_Z с ростом температуры уменьшается. Такое же поведение наблюдается для всех $|J_1/J| > 0,5$. При $|J_1/J| < 0,5$ наблюдается противоположное поведение. Характерная для этой области картина при $|J_1/J| = 0,45$ показана на рис. 4. Видно, что длина волны модулированной фазы уменьшается с повышением температуры. При значениях температуры $T \leq 2,85$ в системе образуются однородно намагниченные области, и при дальнейшем уменьшении температуры система переходит в ферромагнитно упорядоченное состояние. При $|J_1/J| = 0,5$ имеется некоторый интервал температур, в пределах которого длина волны остается практически постоянной. Подобное поведение модулированных структур легко объяснить, если учесть, что при понижении температуры система должна стремиться к своему основному состоянию.

Некоторые зависимости параметров модулированных фаз от отношения констант взаимодействия можно проследить по рис. 5. На этом рисунке представлены модулированные структуры при постоянной температуре для различных значений параметра взаимодействия соседей, следующих за ближайшими J_1 . Как видно, длина волны модулированных структур уменьшается с ростом абсолютного значения отношения обменных параметров $|J_1/J|$.

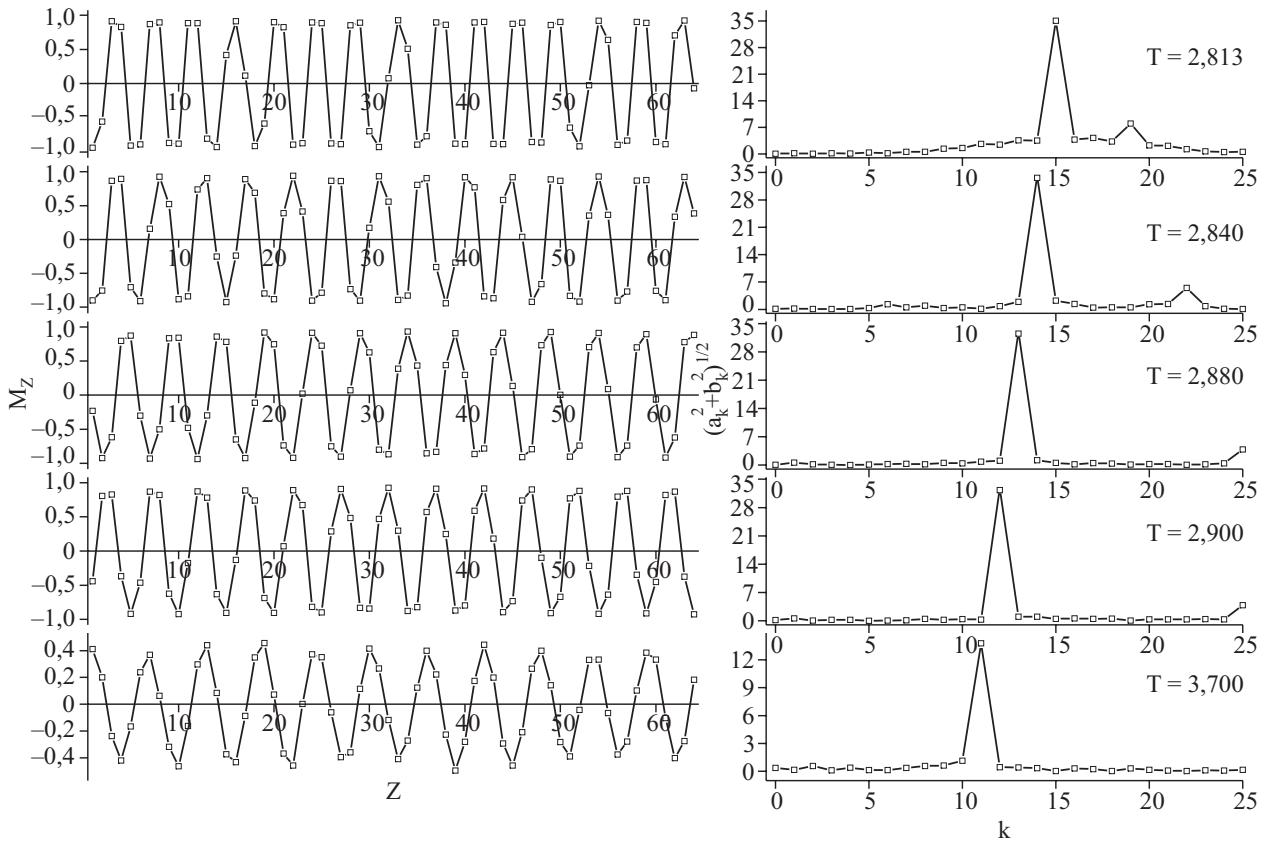


Рис. 3. Модулированные магнитные структуры и амплитуды их фурье-преобразований для $|J_1/J| = 0,55$ при различных температурах T .

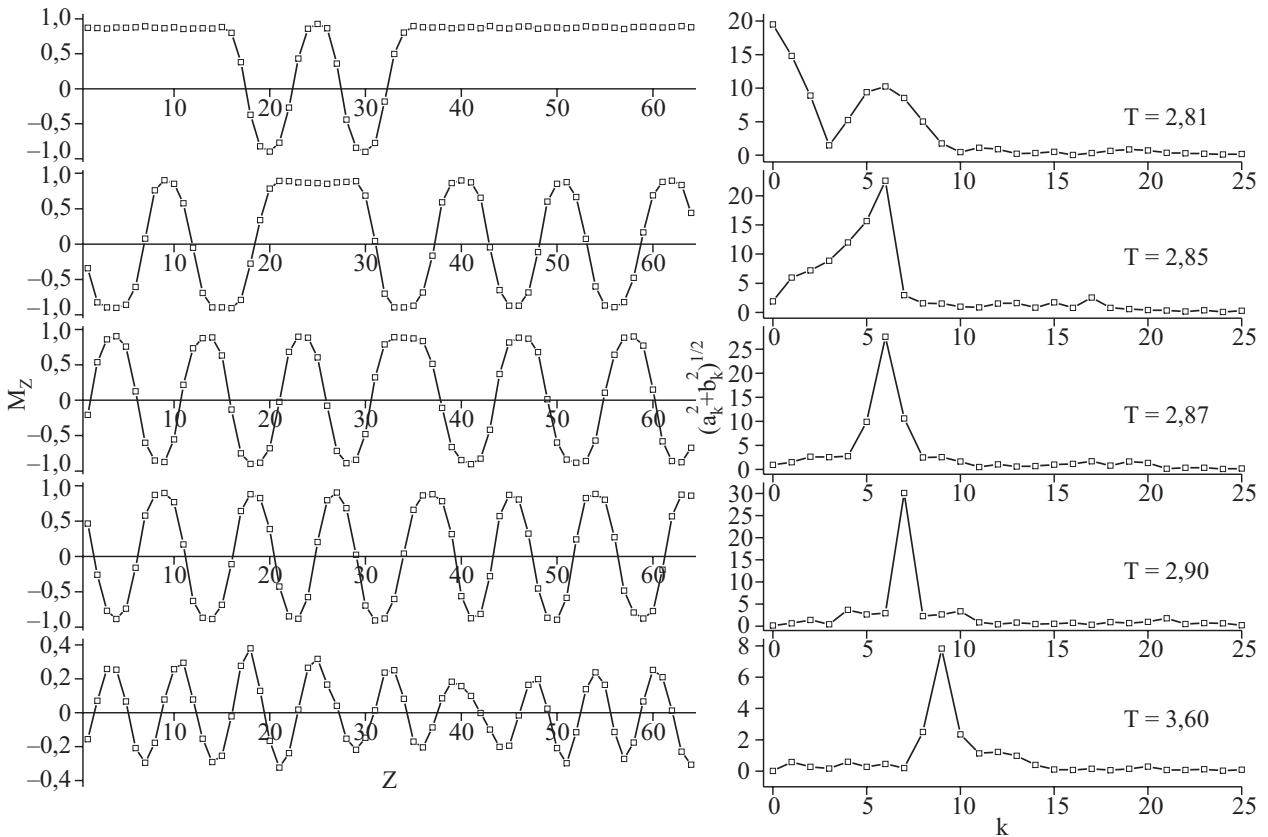


Рис. 4. Модулированные магнитные структуры и амплитуды их фурье-преобразований для $|J_1/J| = 0,45$ при различных температурах T .

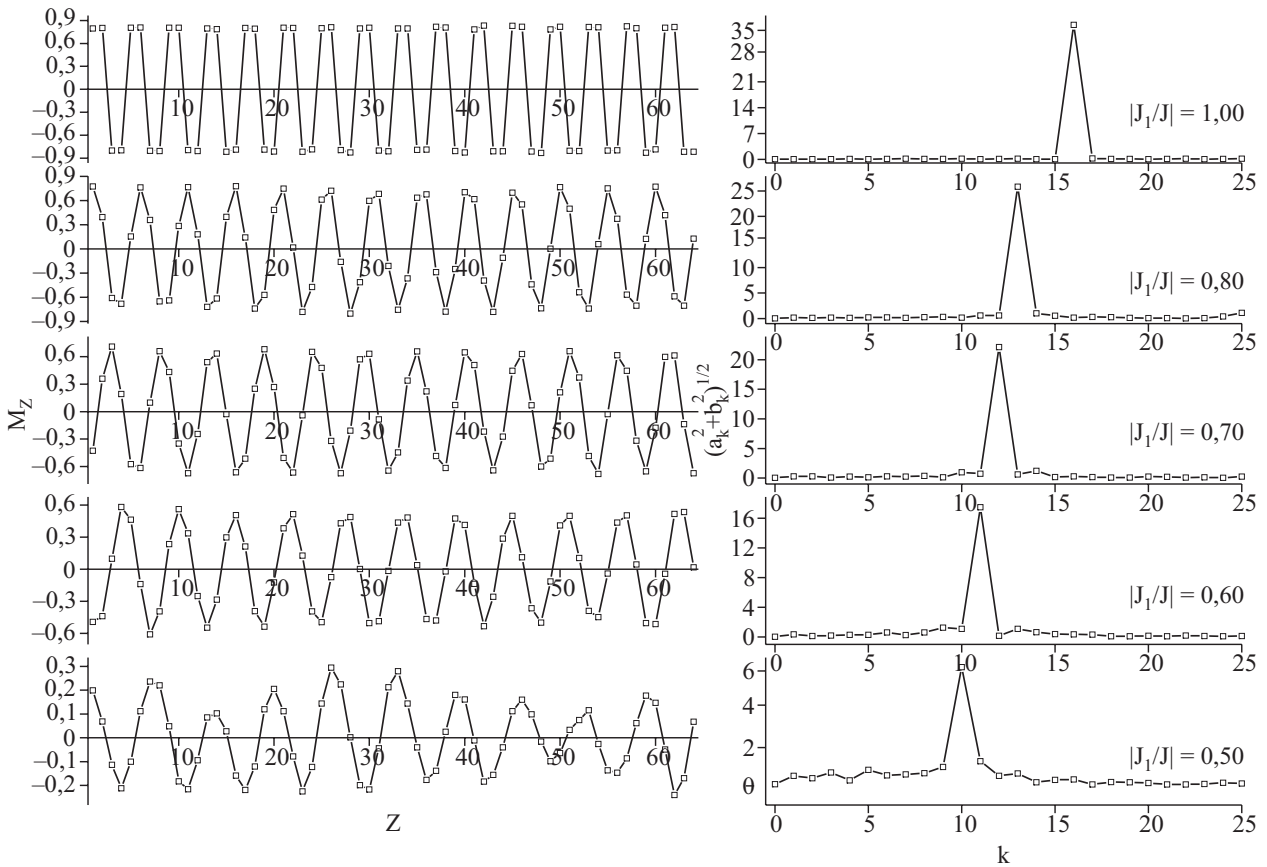


Рис. 5. Модулированные магнитные структуры и амплитуды их фурье-преобразований при температуре $T = 3,70$ для различных значений отношения обменных параметров.

По приведенным рисункам можно отчетливо проследить и эволюцию модулированных структур с изменением температуры и отношения обменных параметров. Например, по рис. 4 можно заметить сосуществование ферромагнитной и модулированной фаз в области перехода и последующий переход в парамагнитную фазу путем постепенного уменьшения амплитуды модулированной фазы.

По результатам фурье-преобразований можно с достаточно высокой степенью точности рассчитать области существования модулированных фаз с различными значениями длины волны. Эти результаты помогают оценить стабильность модулированных фаз. Если на их фурье-образе наблюдаются четко выраженные пики при одном значении k , то можно с большой долей уверенности считать, что структура устойчива в данном интервале температур и отношения констант взаимодействия. Появление на фурье-образе боковых пиков выше или ниже основного свидетельствует о том, что система находится в области перехода из одной модулированной структуры в другую. Переход системы из модулированной фазы в парамагнитную можно определить по резкому увеличению пиков на фурье-образе, что свидетельствует о неперывности его спектра.

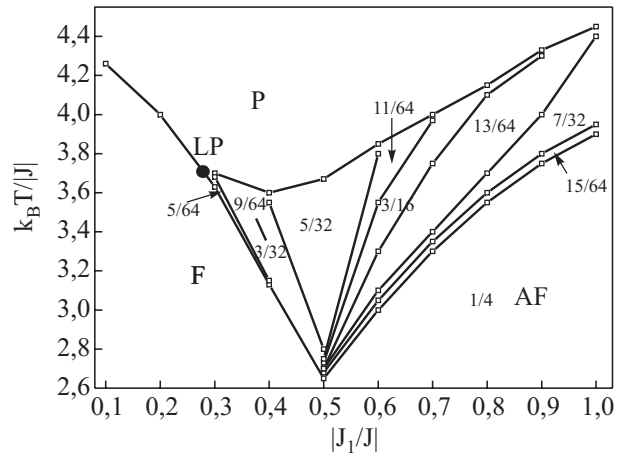


Рис. 6. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями (Построена по результатам МК-вычислений, LP — точка Лифшица, F, AF и P — ферромагнитная, антиферромагнитная и парамагнитная фазы соответственно, дробными числами обозначены значения волнового числа q).

По полученным результатам для рассматриваемой модели построена фазовая диаграмма в координатах $(|J_1/J|, k_B T/|J|)$ (рис. 6). Линии фазовых переходов рассчитаны по результатам фурье-анализа. При этом за

температуру перехода принималась температура, при которой происходит скачкообразное изменение волнового числа модулированных структур.

Как видно из полученной фазовой диаграммы, линии, разделяющие основные фазы модели, имеют тенденцию к пересечению в точке с координатами $|J_1/J| = 0,275$ и $k_B T/|J| = 3,7$. По-видимому, это и есть мультикритическая точка типа Лифшица, в которой одновременно сосуществуют три фазы: парамагнитная, ферромагнитная и модулированная.

4. Заключение

На основе проведенных исследований можно утверждать, что термодинамика систем, в которых возможны длиннопериодические модулированные структуры, характеризуется большим набором фаз и фазовых переходов между ними.

Особенности модулированных структур зависят от области изменения соотношения констант обменного взаимодействия и температуры. Длина волны модулированных структур монотонно убывает с ростом отношения $|J_1/J|$ на всей области его изменения. Характер температурной зависимости длины волны определяется областью изменений $|J_1/J|$. Это изменение таково, что при $|J_1/J| = 0,5$ длина волны остается практически постоянной и равной приблизительно 6,4 интервалам периодичности решетки. Начиная с этого значения, длина волны уменьшается до минимально возможного в данной системе значения, равного 4 при $|J_1/J| > 0,5$, и увеличивается практически до бесконечности в области, для которой $|J_1/J| < 0,5$.

По результатам фурье-анализа рассчитаны фазовые границы и определены области устойчивости различных модулированных фаз. Обобщая все результаты исследования, мы построили фазовую диаграмму рассматриваемой модели. С помощью данной диаграммы предсказана область локализации точки Лифшица.

Отметим, что для успешного исследования длиннопериодических модулированных структур необходимо иметь системы с довольно большими линейными размерами. В нашем исследовании наиболее отчетливые структуры появляются в системе с линейными размерами $L = 64$. По-видимому, полученные нами результаты можно улучшить, исследуя системы больших размеров и с большей точностью, но это улучшение будет, скорее всего, носить количественный характер.

1. Ю.А. Изюмов, *Дифракция нейтронов на длиннопериодических модулированных структурах*, Энергоатомиздат, Москва (1987).
2. И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **47**, 992 (1964).
3. R.M. Hornreich, M. Luban, and S. Strikman, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1678 (1975).
4. E.C. Valadares and J. A. Plascak, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 4967 (1987).
5. Høgh Jensen M. and Per Bak, *Phys. Rev.* **B27**, 6853 (1983).
6. Z. Mo and M. Ferer, *Phys. Rev.* **B43**, 10890 (1991).
7. Paul D. Beale, Phillip M. Duxbury, and Julia Yeomans, *Phys. Rev.* **B31**, 7166 (1985).
8. Nelson Alves and Carlos S.O. Yokoi, *J. Magn. Magn. Mater.* **256**, 145 (2003).
9. Y. Muraoka, T. Kasama, and T. Idogaki, *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276**, E995 (2004).
10. K. Kaski and W. Selke, *Phys. Rev.* **B31**, 3128 (1985).
11. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло*, Наука, Москва (1995).
12. А.К. Муртазаев, *УФН* **178**, 1001 (2008).
13. А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, *Phys. Rev.* **B76**, 174421 (2007).
14. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **126**, 1377 (2004).
15. R.J. Elliot, *Phys. Rev.* **124**, 346 (1961).
16. W. Selke and M.E. Fisher, *Phys. Rev.* **B20**, 257 (1979).
17. P. Bak and J. Boehm, *Phys. Rev.* **B21**, 5297 (1980).
18. N. Metropolis, W. Rosenbluth, and N. Rosenbluth, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).

Investigation of the anisotropic Ising model by the Monte-Karlo method

A.K. Murtazaev and J.G. Ibaev

Long-period modulated structures in the anisotropic Ising model with competitive interactions are investigated by means of the Monte-Carlo method (ANNNI model). The features, character, and temperature dependence of modulated structures are determined and the constant relations of exchange interaction between nearest and next-nearest neighbors are evaluated. A phase diagram is plotted.

PACS: **75.10.-Hk** Classical spin models;
75.20.-g Diamagnetism, paramagnetism, and superparamagnetism;
75.30.-Gw Magnetic anisotropy;
75.40.-Mg Numerical simulation studies.

Keywords: ANNNI model, the Monte-Carlo method, modulated structures, Ising model.