

Компьютерное моделирование полуограниченных антиферромагнетиков в магнитном поле

С.В. Белим
sbelim@mail.ru

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

Аннотация

В статье проведено исследование критического поведения трехмерной полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле методом компьютерного моделирования. Получены значения температуры Нееля для поверхностного и объемного фазовых переходов при различных значениях напряженности магнитного поля. Построена фазовая диаграмма системы.

Введение

Ферромагнитная модель Изинга на двумерной решетке была изучена уже в 1936 году [1]. К середине шестидесятых годов прошлого века было опубликовано достаточно много статей о поведении модели Изинга в нулевом магнитном поле. Работы посвященные ферромагнитной модели Изинга продолжают активно публиковаться до настоящего времени. Антиферромагнитной модели Изинга посвящено значительно меньше работ. В статье [2] была получена кривая поведения антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле в грубом приближении для двумерного и трехмерного случаев. Авторы работы показали, что зависимость температуры фазового перехода от напряженности магнитного поля описывается параболой. Позже в статье [3] было получено аналитическое выражение для температуры Нееля T_N в слабом магнитном поле H :

$$T_N(H) = T_N [1 - 0.012(mH/J)^2 + O(H^4)].$$

В работе [4] было исследовано поведение в сильных магнитных полях. В результате была получена зависимость магнитного поля, от температуры фазового перехода:

$$H = H_C - T_N \ln 2 + O(T_N).$$

Далее в работе [5] было получено выражение для линии вблизи нулевого значения магнитного поля $H = 0$:

$$T_N(H) = T_N^0 (1 - 0.038023259H^2).$$

Для восприимчивости было получено выражение

$$\chi = 0.014718006H^2 \ln(1/t).$$

В этом выражении введено обозначение для приведенной температуры $t = T/T_N$.

Фазовая диаграмма двумерной антиферромагнитной системы в магнитном поле по результатам компьютерного моделирования [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] представлена на рисунке 1. Антиферромагнитная фаза системы находится в заштрихованной области.

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 2018 (DMS-2018), Omsk, Russia, October 2018, published at <http://ceur-ws.org>

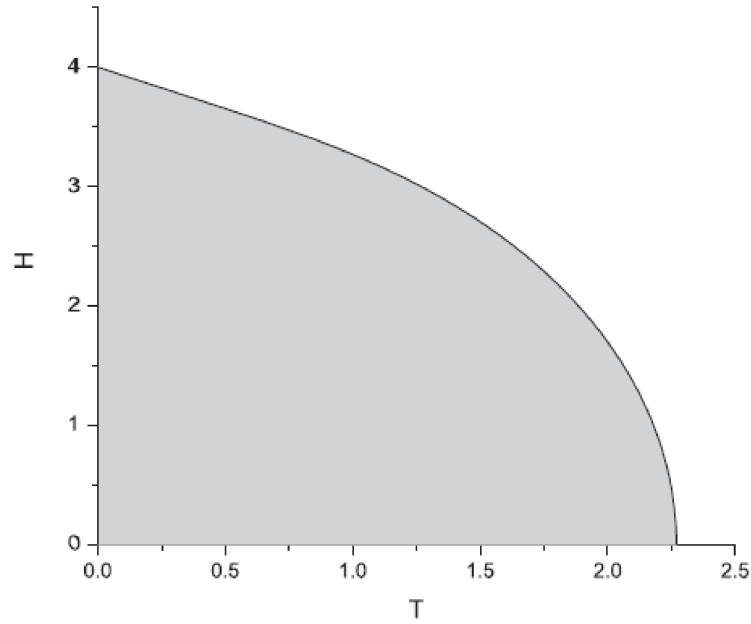


Рис. 1: Фазовая диаграмма двумерной антиферромагнитной системы в магнитном поле.

Компьютерное моделирование фазовых переходов в полуограниченных антиферромагнитных системах было осуществлено в работах [12, 13, 14] и показало, что в системе может наблюдаться поверхностный фазовый переход при температурах отличных от фазового перехода в основном объеме системы.

1 Описание системы

Гамильтониан антиферромагнитной полуограниченной модели Изинга может быть записан в следующем виде:

$$H = -J_B \sum_B S_i S_j - J_S \sum_S S_i S_j - J_{SB} \sum_{SB} S_i S_j + \sum S_i H.$$

Значение спиновых переменных S_i может принимать одно из двух значений ($+1/2$ или $-1/2$). Суммирование в первых трех слагаемых берется только по парам ближайших соседей. В первом слагаемом учитываются только спины расположенные внутри системы, но не на поверхности. Во втором слагаемом суммирование осуществляется только по спинам, расположенным на свободной поверхности системы. В третьем слагаемом суммирование осуществляется по парам спинов, один из которых расположен на свободной поверхности, а второй в первом подповерхностном слое. В последнем слагаемом суммирование осуществляется по всем спинам системы. H – напряженность магнитного поля. J_B , J_S и J_{SB} – значения обменных интегралов взаимодействия между спинами в объеме системы, на свободной поверхности и между спинами поверхности и первым подповерхностным слоем. Как показывает реальный эксперимент [15, 16] и расчеты из первых принципов [17, 18] значение обменного интеграла на поверхности системы J_S может отличаться от обменного интеграла в основном объеме системы J_B , причем возможен как вариант $J_S \geq J_B$, так и $J_S < J_B$. Обменный интеграл J_{SB} принимает значения между значениями J_S и J_B . Введем две величины, показывающих отношения обменных интегралов:

$$R = J_S/J_B, \quad R_1 = J_{SB}/J_B.$$

Будем рассматривать полуограниченные системы. Система будет расположена в полупространстве $z \geq 0$. Исследовались системы размером $L \times L \times 2L$. По двум направлениям OX и OY использовались периодические граничные условия. В положительном направлении оси OZ использовались также периодические граничные условия, но для слоя с номером $2L - 1$ соседним считался слой с номером $L - 1$.

Введем два параметра порядка. Первый параметр порядка m описывает антиферромагнитное упорядочение в основном объеме системы и будет вычисляться как шахматная намагниченность спинов, не

расположенных ни на одной из свободных поверхностей:

$$m = \frac{M_1 - M_2}{L^2(2L-1)}, \quad M_1 = \sum_{i=0}^{L^2(2L-1)/2} S_{2i}, \quad M_2 = \sum_{i=0}^{L^2(2L-1)/2} S_{2i+1}.$$

Для описания поверхностного фазового перехода использовался параметр порядка m_S , вычисляемый как шахматная намагниченность спинов, расположенных на поверхности $z = 0$:

$$m_S = \frac{M_{S1} - M_{S2}}{L^2}, \quad M_{S1} = \sum_{i=0}^{L^2/2} S_{2i}, \quad M_{S2} = \sum_{i=0}^{L^2} S_{2i+1}.$$

Для определения критической температуры использовалась теория конечно размерного скейлинга [19], согласно которой куммулянты Биндера четвертого порядка для систем различного размера пересекаются в одной точке. Эта точка соответствует температуре фазового перехода. Для определения температуры объемного фазового перехода T_N использовались куммулянты Биндера для параметра порядка m :

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}.$$

Угловые скобки использованы для обозначения термодинамического усреднения. Для нахождения температуры поверхностного фазового перехода использовались куммулянты Биндера, вычисляемые на основе параметра порядка m_S :

$$U_S = 1 - \frac{\langle m_S^4 \rangle}{3\langle m_S^2 \rangle^2}.$$

Для определения точек фазового перехода необходимо найти зависимость куммулянтов Биндера от температуры системы для различных значений линейного размера системы L .

2 Результаты компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование осуществлялось для антиферромагнитных полуограниченных систем с линейными размерами от $L = 16$ до $L = 48$ с шагом $\Delta L = 4$. Величина отношения поверхностного обменного интеграла к объемному принимала значения была выбрана равной $R_S = 1.6$. При данном значении в системе наблюдается поверхностный фазовый переход. Для второго отношения обменных интегралов было выбрано значение $R_{BS} = R_S$. В компьютерном эксперименте вычислялась температура Нееля T_N и температура поверхностного фазового перехода T_S . Напряженность магнитного поля изменялась от $H = 0$ до $H = 4.0$ с шагом $\Delta H = 0.5$.

Ранее в работах [12, 13, 14] было показано, что в отсутствии магнитного поля в системе реализуется четыре фазы, связанные с упорядочиванием спинов на свободной поверхности системы и в основном объеме системы: полностью неупорядоченная фаза (SD/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза (SO/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SO/BO), поверхностно-неупорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SD/BO). Между этими фазами возможны четыре линии фазовых переходов: из SD/BD в SO/BD – поверхностный фазовый переход, из SO/BD в SO/BO – экстраординарный фазовый переход, из SD/BD в SO/BO – обычный фазовый переход, из SD/BD в SD/BO – подповерхностный фазовый переход. Кривые этих четырех переходов пересекаются в одной тетракритической точке, в фазовый переход в которой получил название специального. Указанные виды фазовых переходов в рамках теоретико-полевого подхода были изучены в работах [20, 21, 22].

В данной работе основное внимание было уделено исследованию влияния магнитного поля на обычный и поверхностный фазовые переходы. Графики зависимости температуры фазового перехода для неограниченной системы, температуры обычного фазового перехода при $R_S = R_{BS} = 1.6$ и температуры поверхностного фазового перехода при $R_S = R_{BS} = 1.6$ представлены на рисунке 2. Как и для двумерных систем зависимость температуры фазового перехода от напряженности магнитного поля может быть с хорошей точностью аппроксимировано квадратичной функцией. Для температуры Нееля неограниченной системы:

$$T_N = T_N(0) (1 - (0.059 \pm 0.002)H^2),$$

где $T_N(0) = 4.51$ – температура Нееля при нулевом магнитном поле.

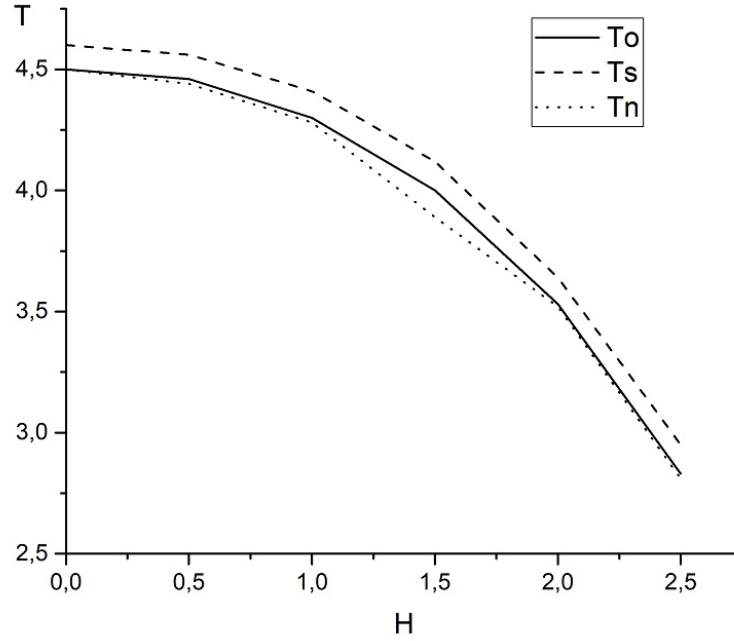


Рис. 2: Графики зависимости температуры фазового перехода для неограниченной системы, температуры обычного фазового перехода при $R_S = R_{BS} = 1.6$ и температуры поверхностного фазового перехода при $R_S = R_{BS} = 1.6$.

Для экстраординарного фазового перехода:

$$T_O = T_O(0) (1 - (0.059 \pm 0.002)H^2),$$

где $T_O(0) = 4.51$ – температура экстраординарного фазового перехода при нулевом магнитном поле.

Для поверхностного фазового перехода:

$$T_S = T_S(0) (1 - (0.057 \pm 0.002)H^2),$$

где $T_S(0) = 4.62$ – температура поверхностного фазового перехода при нулевом магнитном поле.

Выводы

Как видно из графиков с точностью до погрешностей вычислений, температура экстраординарного фазового перехода совпадает с температурой Нееля для бесконечных систем при всех значениях напряженности магнитного поля. Также остается постоянной разность между температурой экстраординарного фазового перехода и температурой поверхностного фазового перехода. Зависимость температуры от напряженности магнитного поля носит квадратичный характер для всех видов фазовых переходов. Температуры обычного и экстраординарного фазовых переходов становится нулевой при $H_O = 4.12$. Температура поверхностного фазового перехода принимает нулевое значение при $H_S = 4.19$. Оба значения близки к результату, полученному ранее для двумерных систем $H_{2D} = 4$.

Список литературы

- [1] R.E. Peirls. On Ising's model of ferromagnetism. *Proc. Camb. Philos. Soc.*, 32:477–481, 1936.
- [2] C. Domb, M.S. Green. Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 3. *Academic Press, London*, 1974.
- [3] D.C. Rapaport, C. Domb. The smoothness postulate and the Ising antiferromagnet. *J. Phys. C*, 4(16):2684–2694, 1971.
- [4] E. MOuller-Hartmann, J. Zittartz. Interface free energy and transition temperature of the square-lattice Ising antiferromagnet at finite magnetic field. *Z. Physik B* 27(3):261–266, 1971.

- [5] J.L. Monroe. Systematic approximation method for the critical properties of lattice spin systems. *Phys. Rev. E* 64:016126, 2001.
- [6] R. Bulirsh, J. Stoer. Fehlerabschätzungen und Extrapolation mit rationalen Funktionen bei Verfahren vom Richardson-Typus *Numer. Math.*, 6:413–427, 1964.
- [7] J.M. Vanden Broeck, L.W. Schwartz. A one-parameter family of sequence transformations. *J. Math. Anal.* 10:658–666, 1979.
- [8] X.N. Wu, F.Y. Wu. Critical line of the square-lattice Ising model. *Phys. Lett. A*, 144:123–126, 1990.
- [9] H.W.J. Blote, X.N. Wu. Accurate determination of the critical line of the square Ising antiferromagnet in a field. *J. Phys. A*, 23:L627–L629, 1990.
- [10] X.-Z. Wang, J.S. Kim. The Critical Line of an Ising Antiferromagnet on Square and Honeycomb Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 78:413–416, 1997.
- [11] A.A. Tarasenko, L. Jastrabik, F. Nieto, C. Uebing. Adatom diffusion on a square lattice: Comparison of real-space renormalization group and Monte Carlo approaches. *Phys. Rev. B*, 59:8252–8261, 1999.
- [12] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Computer Modeling of Phase Transitions of Semibounded Antiferromagnets. *Journal of Physics: Conf. Series*, 944:012011(1–7), 2017.
- [13] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Computer Simulation of Critical Behavior of Semi-Infinite Antiferromagnetic Material. *Physics of Metals and Metallography*, 119(5):441–447, 2018.
- [14] S.V. Belim, E.V. Trushnikova. Research into the Surface Phase Transition of Semibounded Antiferromagnetic Systems via Computer Simulation. *J. of Surface Investigation*, 12(5):923–926, 2018.
- [15] P. Ruiz-Diaz, V.S. Stepanyuk. Effects of surface charge doping on magnetic anisotropy in capping 3d-5d(4d) multilayers deposited on highly polarizable substrates. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47:105006, 2014.
- [16] O.O. Brovko, P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa, V.S. Stepanyuk. Controlling magnetism on metal surfaces with non-magnetic means: electric fields and surface charging. *J. Phys. Condens. Matter.*, 26:093001, 2014.
- [17] C.-Yu. Lin, J.-L. Li, Y.-H. Hsieh, K.-L. Ou, B.A. Jones. Magnetic interaction between surface-engineered rare-earth atomic spins. *Phys. Rev. X*, 2:021012, 2012.
- [18] P. Ruiz-Diaz, T.R. Dasa, V.S. Stepanyuk. Tuning Magnetic Anisotropy in Metallic Multilayers by Surface Charging: An Ab Initio Study. *Phys. Rev. Lett.*, 110:267203, 2013.
- [19] D.P. Landau, K. Binder. Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 17:2328–2342, 1978.
- [20] H.W. Diehl, M. Shpot. Massive field-theory approach to surface critical behavior in three-dimensional systems. *Nucl. Phys. B*, 528:595–647, 1998.
- [21] S.V. Belim. Critical behavior of disordered systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 103:611–623, 2006.
- [22] S.V. Belim. Multicritical behavior of systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 106: 773–780, 2008.

Computer Modeling of Semi-Infinite Antiferromagnets in a Magnetic Field

Sergey V. Belim

In article the research of critical behavior for the three-dimensional semi-infinite antiferromagnetic Ising model in a magnetic field is made by method of computer modeling. The Neel temperature for the surface and bulk phase transition at various magnetic intensity are received. The phase diagram of system is constructed.