

Компьютерное моделирование критического поведения полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга

Е.В. Трушникова
TrushnikovaEV@omsu.ru

С.В. Белим
belimsv@omsu.ru

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

Аннотация

Проведено компьютерное моделирование критического поведения трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с плоской свободной границей. Исследовано поведение системы при различных значениях параметров. Построена фазовая диаграмма. Определено значение параметров для тетракритической точки. Вычислена зависимость температуры фазового перехода от параметров системы.

Введение

Явление поверхностного магнетизма состоит в отличии температуры упорядочивания спинов на поверхности от температуры упорядочивания остальных спинов системы. Причиной данного явления является разность между значениями обменного интеграла для спинов на поверхности и в глубине образца. Поверхностное упорядочивание для антиферромагнитных систем наблюдалось в ряде экспериментальных работ [1, 2, 3]. Теоретически, в рамках теории среднего поля, поверхностный магнетизм был описан в статье [4], в которой было показано, что температура фазового перехода на поверхности может отличаться от соответствующей температуры Нееля. В этой и других теоретических работах [5, 6, 7] была получена фазовая диаграмма системы, содержащая три фазы: неупорядоченная фаза (SD/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза (SO/BD) и поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SO/BO) рисунок 1.

При этом на фазовой диаграмме системы наблюдается три линии переходов, пересекающихся в трикритической точке. Переход из SD/BD в SO/BD носит название поверхностного (surface) фазового перехода, из SO/BD в SO/BO – экстраординарного (extraordinary) фазового перехода, из SD/BD в SO/BO – обычного (ordinary) или объемного фазового перехода. Пересечение этих трех линий фазовых переходов образует мультикритическую точку, фазовый переход в которой получил название специального (special) фазового перехода. Названия для переходов были впервые введены в работе [8]. В рамках теоретико-полевого подхода критическое поведение полуограниченной модели Изинга было рассмотрено в работах [9, 10].

Целью данной статьи является исследование фазовых переходов в полуограниченной антиферромагнитной модели Изинга методом компьютерного моделирования при различных значениях поверхностной энергии и построение соответствующей фазовой диаграммы.

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>

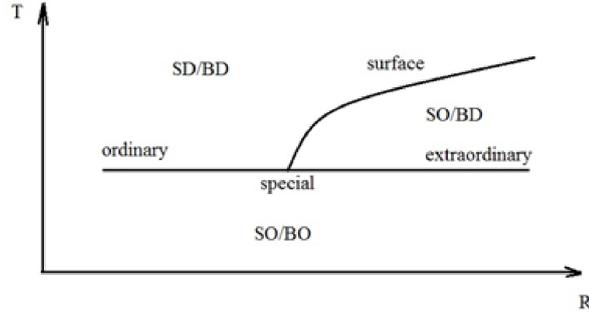


Рис. 1: Фазовая диаграмма с трикритической точкой

1 Описание системы

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

$$H = -J_B \sum_B S_i S_j - J_S \sum_S S_i S_j,$$

где S_i – значения спина в i -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$). Суммирование осуществляется только по ближайшим соседям. Вторая сумма включает в себя только поверхностные спины, первая сумма – все остальные. Поверхностный (J_S) и объемный (J_B) обменные интегралы в большинстве реальных систем имеют различные значения. Причем J_S может иметь значения как больше, так и меньше J_B .

В данной работе проводилось компьютерное моделирование трехмерных систем с кубической решеткой, имеющих линейные размеры $L \times L \times 2L$ методом Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса. Плоскость свободной границы задавалась уравнением $z = 0$, система располагалась в полупространстве $z \geq 0$. Использовались периодические граничные условия. Для спинов, расположенных в плоскости $z = 2L$ соседними считались спины в плоскости $z = L$. Для определения температуры фазового перехода и критических индексов использовалась теория конечно размерного скейлинга.

Для описания антиферромагнитного упорядочивания введем два параметра порядка – m и m_s . Параметр порядка m вычисляется как шахматная намагниченность всей системы и равен разности магнитных моментов двух подрешеток. Поверхностный параметр порядка m_s вычислялся как шахматная намагниченность спинов, расположенных на свободной поверхности.

Для наблюдения за поведением теплоемкости и восприимчивости в объеме системы и на ее поверхности использовались флуктуационные соотношения:

$$C = NK^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad \chi = NK (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad C_s = SK^2 (\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2), \quad \chi_s = SK (\langle m_s^2 \rangle - \langle m_s \rangle^2).$$

$K = |J_B|/k_B T$, $N = 2L^3$ – число узлов в системе, $S = L^2$ – число узлов на поверхности, E – внутренняя энергия, E_s – поверхностная энергия. Угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

Критическая температура перехода определялась с помощью объемных и поверхностных куммулянтов Биндера четвертого порядка:

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

Температура фазового перехода может быть определена по положению точки пересечения куммулянтов для систем с различными размерами L . По точке пересечения объемных куммулянтов U определялась температура объемного фазового перехода T_N , по точке пересечения поверхностных куммулянтов U_s – температура поверхностного фазового перехода T_s .

2 Результаты компьютерного моделирования

Компьютерный эксперимент проводился для систем с линейными размерами от $L = 12$ до $L = 32$ с шагом $L = 4$. Количество шагов Монте-Карло на спин было равно 100 000. Значение отношения обменных интегралов $R = J_S/J_B$ пробегало значения от $R = 1.0$ до $R = 2.0$ с шагом $\Delta R = 0.1$, на отрезке от $R = 1.30$ до $R = 1.45$ моделирование осуществлялось с шагом $\Delta R = 0.01$. Для каждого значения R определялись

критическая температура как фазового перехода на поверхности системы, так и в объеме системы. Фазовая диаграмма системы приведена на рисунке 2.

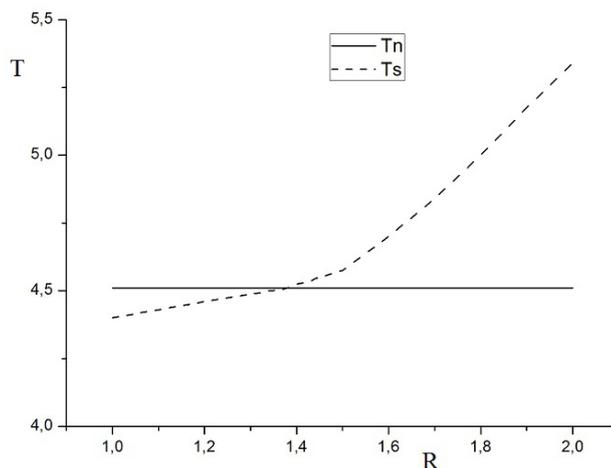


Рис. 2: Фазовая диаграмма системы. Сплошной линией показана зависимость температуры объемного фазового перехода T_n от отношения обменных интегралов R , пунктирной линией изображена зависимость температуры поверхностного фазового перехода T_s от R

Как видно из фазовой диаграммы, в системе наблюдается присутствие поверхностно-неупорядоченной объемно-упорядоченной фазы (SD/BO). Возможность существования данного состояния была экспериментально обнаружена для Fe_3BO_6 [11, 12] и $FeBO_3$ [13]. Условием наличия данной фазы является более низкая поверхностная магнитная энергия по сравнению с объемной энергией.

Также следует отметить, что в отличие от предсказаний теории, и аналогичных результатов для ферромагнитных систем, для антиферромагнетиков на фазовой диаграмме присутствует тетракритическая точка, наблюдаемая при $R = 1.38$.

Распределение намагниченности в слоях, близких к поверхности, существенно отличается левее и правее тетракритической точки. На рисунке 3 приведена зависимость намагниченности от номера слоя при температуре Нееля $T_n = 4.51$ при $R = 1.00$ для системы с линейным размером $L = 32$. Как видно из рисунка намагниченность возрастает вглубь образца.

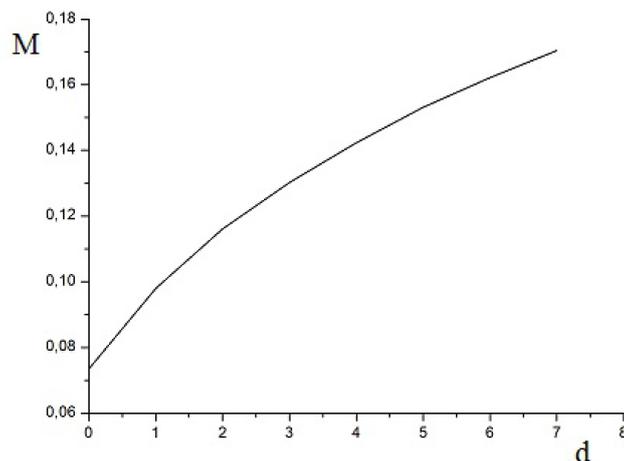


Рис. 3: Зависимость намагниченности от расстояния до свободной поверхности d при $R = 1.00$

На рисунке 4 приведена зависимость намагниченности от номера слоя при температуре Нееля $T_n = 4.51$ при $R = 1.50$ для системы с линейным размером $L = 32$. В этом случае намагниченность убывает вглубь образца.

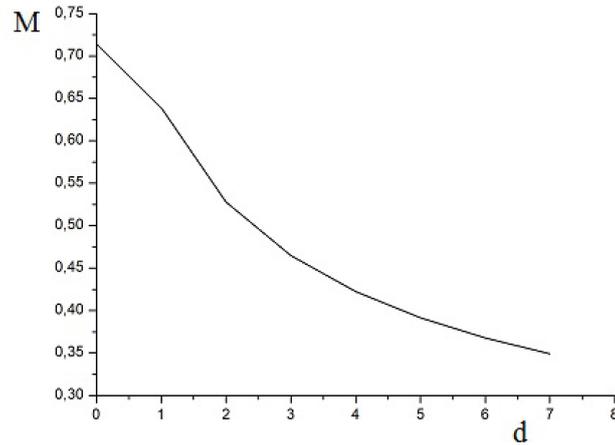


Рис. 4: Зависимость намагниченности от расстояния до свободной поверхности d при $R = 1.50$

На рисунке 5 приведена зависимость намагниченности от номера слоя при температуре Нееля $T_n = 4.51$ в тетракритической точке при $R = 1.38$ для системы с линейным размером $L = 32$.

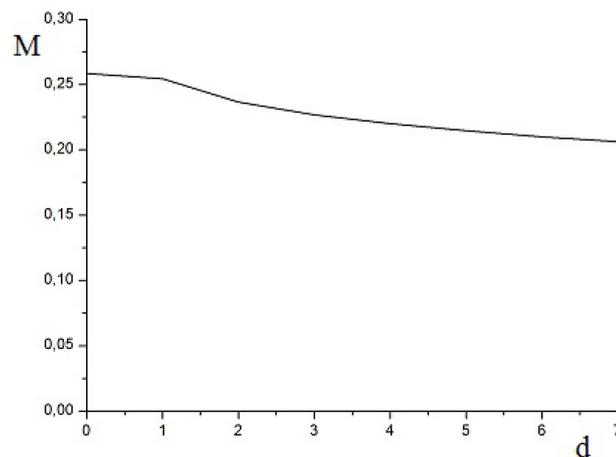


Рис. 5: Зависимость намагниченности от расстояния до свободной поверхности d при $R = 1.38$

Из сравнения трех последних рисунков видно, что при переходе через тетракритическую точку изменяется характер распределения намагниченности в при удалении от поверхности системы.

Список литературы

- [1] M. Campagna. Surface Magnetism: Recent Progress and Opportunities. *J. Vac. Sci. Technol. A.*, 3(3):1491–1495, 1985.
- [2] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev. Mossbauer study of surface magnetic properties of the antiferromagnet Fe_3B_06 near the Neel temperature. *JETP Lett.*, 57(9):552–556, 1993.
- [3] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev. Simultaneous triple-radiation Mossbauer spectroscopy investigation of surface and bulk magnetic properties of Fe_3Bo_6 near Neel temperature. *JETP*, 78:200–207, 1994.
- [4] D.L. Mills. Surface Effects in Magnetic Crystals near the Ordering Temperature. *Phys. Rev.*, 3(11):3887–3894, 1971.
- [5] K. Binder. Magnetic surface phenomena. *Phase transition and critical phenomena*, Ed. by Domb C. And Lebowitz J.L., NY Academ. Press, 3:325–331, 1983.

- [6] M.I. Kaganov. Surface Magnetism. *JETP*, 35(3):631–633, 1972.
- [7] H.W. Diehl. The Theory of Boundary Critical Phenomena. *J. Mod. Phys. B.*, 11:3503–3523, 1997.
- [8] T.C. Lubensky, H. Rubin. Critical phenomena in semi-infinite systems. II. Mean-field theory. *Phys. Rev. B.*, 12:3885–3901, 1975.
- [9] S.V. Belim. Critical behavior of disordered systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 103:611–623, 2006.
- [10] S.V. Belim. Multicritical behavior of systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 106: 773–780, 2008.
- [11] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev. Mossbauer Study Of The Surface And Bulk Properties Of Fe_3BO_6 In The Critical-Temperature Region. *FIZIKA TVERDOGO TELA*, 32(11):3278–3281, 1990.
- [12] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev. Mossbauer Study Of Spin-Flip Phase-Transition On The Fe_3BO_6 Surface. *JETP Lett.*, 57(9):557–561, 1993.
- [13] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev, S.A. Kamzin. Mossbauer Study Of The Surface And Bulk Reorientational Phase-Transition In Ga-doped Fe_3BO_6 Macrocrystal. *FIZIKA TVERDOGO TELA*, 36(5):1399–1415, 1994.

Computer Simulation of Semi-Infinite Antiferromagnetics Ising Models Critical Behavior

Elizaveta V. Trushnikova, Sergey V. Belim

Computer simulation of the three-dimensional antiferromagnetic Ising model critical behavior with plane free boundary is carried out. The system behavior in case of different parameter values is investigated. The phase diagram is constructed. The parameter value for tetracritical point is defined. The dependence of phase transition temperature on system parameters is calculated.