

УДК 537.9, 004.942

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА MnTe МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

<sup>1,2</sup> М. А. Магомедов, <sup>1</sup> Я. К. Абуев, <sup>2</sup> А. А. Муртазаева, <sup>2</sup> Р. А. Муртазалиев

<sup>1</sup> Институт физики ДНЦ РАН

<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет

Предложена модель реального двухподрешеточного антиферромагнетика MnTe, учитывающая все основные кристаллографические и магнитные свойства данного материала. Разработан гибридный алгоритм метода Монте-Карло, основанный на однокластерном алгоритме Вульфа и алгоритме Метрополиса, позволяющий исследовать термодинамические свойства сложных моделей магнитных материалов. Проведены высокоточные исследования модели MnTe и построены температурные зависимости различных термодинамических параметров. Определена критическая температура фазового перехода и показано, что в данной системе происходит фазовый переход второго рода. Показано, что результаты численного моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными для макрообразцов MnTe.

A model of the real two-sublattice antiferromagnetic material MnTe is proposed. The model possesses all the main crystallographic and magnetic properties of the material. The hybrid algorithm of the Monte Carlo method, based on the single-cluster Wolfe algorithm and the Metropolis algorithm, allow us to investigate the thermodynamic properties of the complex models of magnetic materials. Temperature dependences of various thermodynamic parameters of the MnTe model are investigated. Critical temperatures of phase transition are determined and show that phase transition in this system is of the second order. It is shown that the results of numerical simulation are in good agreement with the experimental data obtained for macro samples of MnTe.

Ключевые слова: фазовые переходы; антиферромагнетики; компьютерное моделирование; метод Монте-Карло; кластерные алгоритмы.

Keywords: phase transitions; antiferromagnetic; computer simulation; Monte Carlo method; cluster algorithm.

### 1. Введение

В последние годы большое внимание уделяется исследованию методами Монте-Карло (МК) моделей реальных магнитных материалов, в которых наряду с обменным взаимодействием учитываются и другие усложняющие факторы, присущие реальным системам, но не учитываемые в моделях первого приближения (в таких моделях, как классическая модель Изинга, Гейзенберга и т.д.). К ним могут быть отнесены: анизотропия и примеси, многоспиновый обмен, диполь-дипольное взаимодействие, учет колебаний решетки и ряд других. Строгое исследование таких систем на основе микроскопических гамильтонианов методами современной теоретической физики – задача чрезвычайно сложная [1–4].

Нами с использованием высокоэффективного гибридного алгоритма метода Монте-Карло, основанного на сочетании стандартного алгоритма Метрополиса и однокластерного алгоритма Вульфа [5], выполнены высокоточные исследования статических критических свойств модели реального двухподрешеточного антиферромагнетика MnTe.

MnTe имеет кристаллографическую структуру, изображенную на рис. 1. С учетом всех особенностей реального материала гамильтониан модели MnTe может быть представлен в следующем виде [6, 7]:

$$H = -\frac{1}{2} J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{1}{2} J_2 \sum_{\langle k,l \rangle} S_k S_l - \frac{1}{2} J_3 \sum_{\langle m,n \rangle} S_m S_n - D \sum_i (S_i^x)^2, \quad |\vec{S}_i| = 1, \quad (1)$$

где первый член учитывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ионов Mn (первых ближайших соседей) вдоль оси  $c$  ( $J_1 < 0$ ), второй – ферромагнитное взаи-

модействие между ионами Mn внутри одной плоскости (вторых ближайших соседей), ( $J_2 > 0$ ), третий – антиферромагнитное взаимодействие третьих ближайших соседей вдоль оси  $\mathbf{c}$  ( $J_3 < 0$ ), четвертый – анизотропию типа «легкая ось».

Согласно данным лабораторных экспериментов значения обменных интегралов и анизотропии в данном материале равны [6–9]:

$$\begin{aligned} J_1 / k_B &= -21.5 \pm 0.3 \text{ К}, & J_2 / k_B &= 0.67 \pm 0.05 \text{ К}, \\ J_3 / k_B &= -2.87 \pm 0.04 \text{ К}, & D / k_B &= -0.26 \pm 0.03 \text{ К}. \end{aligned}$$

## 2. Метод исследований

Кластерные алгоритмы метода МК, разработанные в последние годы, оказались весьма эффективными при исследовании критических явлений в различных классических моделях, таких как модель Изинга, Гейзенберга, XY-модель, и т.д. [3, 5]. Критические параметры системы, рассчитанные на основе кластерных алгоритмов, отличаются высокой точностью и надежностью. Тем не менее, эффективность и работоспособность кластерных алгоритмов при исследовании сложных реалистичных моделей реальных магнитных материалов, в которых наряду с обменным взаимодействием учитываются другие возмущающие факторы (анизотропия, диполь-дипольное взаимодействие, многоспиновый обмен, различного рода примеси, учет колебаний решетки и т.д.), не достаточно полно изучена [1–4].

Среди всех кластерных алгоритмов метода МК простотой в реализации и высокой эффективностью выделяется однокластерный алгоритм Вульфа. Нами было выполнено обобщение этого алгоритма для исследования систем, которые могут быть описаны гамильтонианом типа (1). Соответствующий алгоритм может быть представлен в следующем виде:

1. Случайным образом задается направление единичного вектора  $\mathbf{r}$ . Вектор  $\mathbf{r}$  определяет плоскость, относительно которой будут зеркально отражаться все спины, вошедшие в кластер. После отражения спинов энергия обменного взаимодействия между спинами, вошедшими в кластер, остается неизменной:

$$\mathbf{S}_i^{\text{old}} \mathbf{S}_j^{\text{old}} = \mathbf{S}_i^{\text{new}} \mathbf{S}_j^{\text{new}}. \quad (2)$$

В случае учета одноосной анизотропии для корректной работы алгоритма вектор  $\mathbf{r}$  следует выбирать таким образом, чтобы вклад анизотропии в гамильтониан при повороте кластера не изменялся, т.е. модуль  $\mathbf{x}$ -компоненты спина должна сохраниться  $|\mathbf{S}_{i,\text{new}}^x| = |\mathbf{S}_{i,\text{old}}^x|$ . Для этого необходимо выбирать вектор  $\mathbf{r}$  вдоль оси  $\mathbf{x}$  или в плоскости  $\mathbf{yz}$ . В первом случае  $\mathbf{S}_i^x$  меняет знак, а компоненты  $\mathbf{S}_i^y$  и  $\mathbf{S}_i^z$  остаются неизменными. Во втором случае  $\mathbf{S}_i^x$  остается неизменной, а изменяются компоненты  $\mathbf{S}_i^y$  и  $\mathbf{S}_i^z$ .

2. Случайным образом выбирается один из спинов решетки  $\mathbf{S}_i$ , в дальнейшем будем называть этот спин «центральным».

3. Посещаются все ближайшие соседи  $j$  выбранного  $i$ -го спина. Связь  $\langle ij \rangle$  активизируется с вероятностью:

$$P = 1 - \exp \left\{ \min \left[ 0, -2J_{ij} \beta (\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_i^{\text{old}})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_j^{\text{old}}) \right] \right\}, \quad (3)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ , а  $J_{ij}$  принимает значение  $J_1$ ,  $J_2$  или  $J_3$ . Следует отметить, что вероятность активации связи может быть представлена также в следующем виде:

$$P = 1 - \exp \left\{ \min \left[ 0, -J_{ij} \beta \Delta U_{obm} \right] \right\}, \quad (4)$$

где  $\Delta U_{obm} = \mathbf{S}_i^{\text{old}} \mathbf{S}_j^{\text{old}} - \mathbf{S}_i^{\text{new}} \mathbf{S}_j^{\text{old}}$ .

4. Если связь  $\langle ij \rangle$  активизируется, то спин в узле  $j$  включается в кластер. Следует отметить, что один и тот же спин может быть включен в кластер только один раз, тогда как проверен на вхождение в кластер несколько раз.

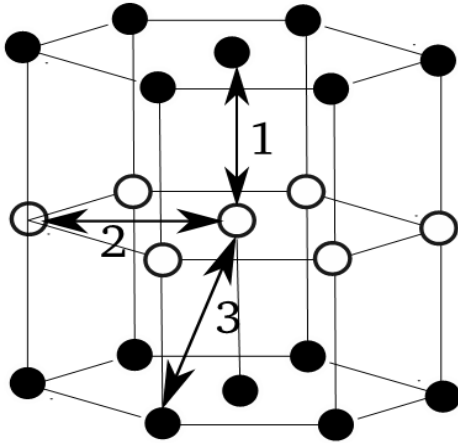
5. После проверки всех ближайших соседей спина  $i$  первый включенный в кластер спин  $j$  становится «центральным» и начинается процесс установления связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока

не будут проверены ближайшие соседи всех вошедших в кластер спинов или достигнуты границы системы.

6. Таким образом, в результате шагов 1–5 получается система связанных друг с другом спинов – «кластер», который переворачивается с вероятностью  $P_{flip} = 1$ . Переворот кластера заключается в зеркальном отражении всех спинов, вошедших в кластер, через плоскость перпендикулярную вектору  $\mathbf{r}$  [3, 4]:

$$\mathbf{S}_i^{new} = \mathbf{S}_i^{old} - 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_i^{old}) \cdot \mathbf{r}. \quad (5)$$

Следует отметить, что в случае учета одноосной анизотропии алгоритм является неэргодичным, и его следует использовать в сочетании с другими алгоритмами [3]. Нами однокластерный алгоритм применялся в сочетании со стандартным алгоритмом Метрополиса. При проведении исследований на каждом МК шаге сначала строится и переворачивается кластер, затем  $N$  раз ( $N$  – число спинов в системе) совершаются перевороты отдельных спинов стандартным алгоритмом (1 МК шаг).



**Рис. 1.** Магнитная структура MnTe. Стрелками и соответствующими цифрами на рисунке обозначены обменные взаимодействия  $J_1$ ,  $J_2$  и  $J_3$

Исследование проводилось для систем кубической формы с линейными размерами  $L \times L \times L$  ( $L = 8 \div 96$ ), и числом спинов  $N = 512 \div 884736$ . При проведении исследований учитывались все кристаллографические особенности реальных макрообразцов MnTe [6–14].

Для снятия эффектов, связанных с малостью размеров моделируемых систем, при проведении исследований на систему накладывались периодические граничные условия. Начальные конфигурации задавались таким образом, что все спины упорядочены вдоль оси  $\mathbf{x}$ , причем спины в одной подрешетке (обозначены черными кружками на рисунке 1) направлены противоположно спином в другой подрешетке (обозначены светлыми кружками на рисунке 1). На ЭВМ генерировались марковские цепи длиной до  $5 \times 10^8$  МК шагов/спин. Для вывода системы в равновесное состояние отсекались неравновесные участки марковской цепи длиной до  $1 \times 10^8$  МК шагов/спин.

### 3. Результаты исследований и обсуждение

При вычислении термодинамических характеристик системы, таких как параметр порядка  $q$ , теплоемкость  $C$ , восприимчивость  $\chi$  использовались следующие флуктуационные соотношения [1–4, 15]:

$$q = \langle m_1 - m_2 \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \in A} S_i - \sum_{i \in B} S_i \right\rangle, \quad (6)$$

$$C = (NK^2) \left( \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (7)$$

$$\chi = (NK) \left( \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2 \right), \quad (8)$$

где  $K = |J_1|/k_B T$ ,  $m_1$ ,  $m_2$  – магнитные моменты подрешеток.

Рассчитанные таким образом значения параметра порядка  $q$  и теплоемкости  $C$  приведены на рис. 2 и 3. Как видно из рис. 2, параметр порядка  $q$  в низкотемпературной области практически не зависит от размеров системы, в то время как при высоких температурах для систем малых размеров наблюдаются характерные для Монте-Карло результатов высокотемпературные «хвосты», которые, однако, с ростом размеров системы заметно уменьшаются. Отметим также, что здесь и далее погрешность данных не превышает размеры использованных на рисунках символов.

При исследовании критических свойств магнитных материалов большое значение имеет точность определения критической температуры. Нами для определения температуры фазового перехода использовался высокоточный метод кумулянтов Биндера [15]:

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

Отметим, что если в системе происходит фазовый переход первого рода, то вместо параметра порядка в (9) фигурирует энергия системы  $E$ :

$$U_L(E) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}. \quad (10)$$

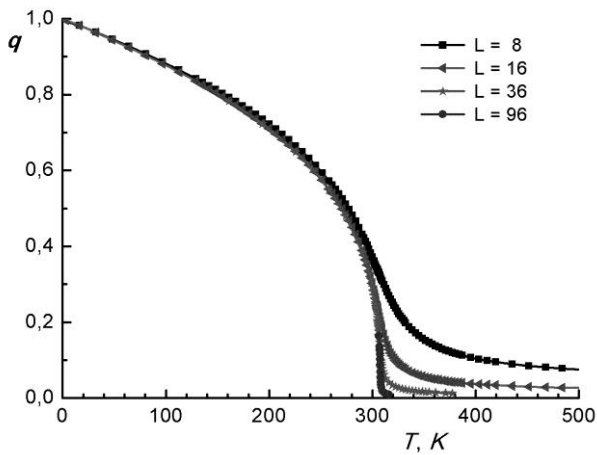


Рис. 2. Температурная зависимость параметра порядка  $q$

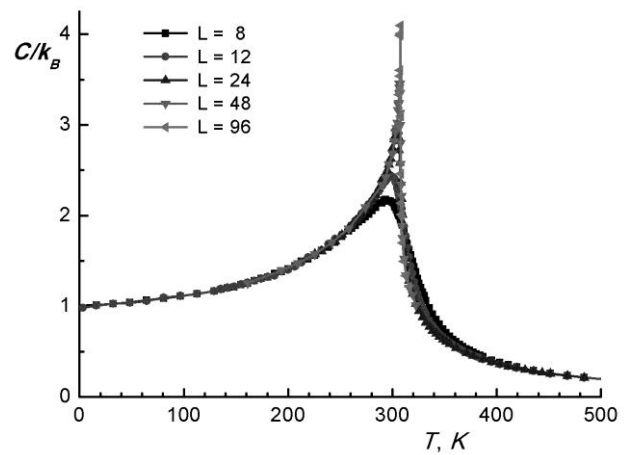
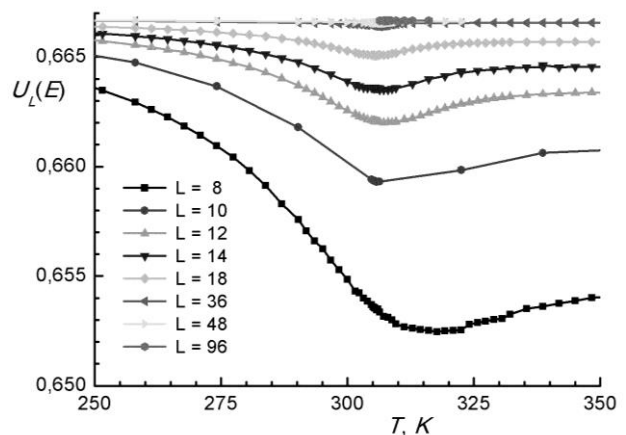
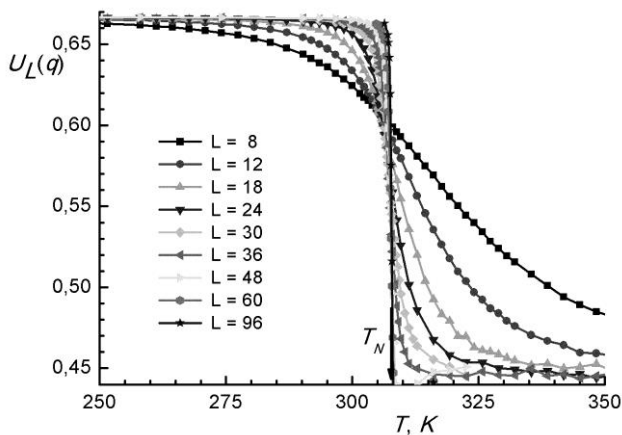


Рис. 3. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $T$

Рассчитанные таким образом кумулянты для систем с различными линейными размерами приведены на рис. 4 и 5.

Кумулянты Биндера также позволяют судить о типе фазового перехода. Если в системе происходит фазовый переход первого рода, то кумулянты Биндера по энергии  $U_L(E)$  имеют ярко выраженный минимум, который не исчезает с увеличением линейных размеров исследуемых систем, а кумулянты по параметру параметру порядка  $U_L(q)$  в области фазового перехода принимают отрицательные значения. В случае фазового перехода второго рода минимум в кумулянтах  $U_L(E)$  с увеличением линейных размеров системы исчезает, а  $U_L(q)$  в точке фазового перехода не зависит от линейных размеров системы (т.е.  $U_L(q)$  для различных размеров пересекаются в одной точке) [4, 15].



**Рис. 4.** Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(q)$  по параметру порядка

**Рис. 5.** Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(E)$  по энергии

Как видно из рисунков, в данном материале происходит фазовый переход второго рода, и рассчитанная по кумулянтам критическая температура для модели MnTe составила  $T_N = 307.5(5)$  K, что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными  $T_N = 310$  K [6–8].

Таким образом, наши данные, полученные комбинацией модифицированного одно-кластерного алгоритма Вульфа и стандартного алгоритма Метрополиса, свидетельствуют о высокой эффективности данного метода. Рассчитанные термодинамические характеристики находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и свидетельствуют о возможности и применимости кластерных алгоритмов для исследования сложных моделей реальных магнитных материалов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №12-02-96504 p\_юг\_a) и Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.1092 «Разработка и исследование моделей перспективных наноструктур методами компьютерного моделирования».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Камиллов И.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей // ЖЭТФ. 2001. Т. 120, № 6. С. 1535–1543.
2. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A. Monte-Carlo investigation of critical phenomena in models of real magnetism with crossovers // Comp. Phys. Comm. 2002. Vol. 147/1–2. P. 447–450.
3. Магомедов М.А., Муртазаев А.К. Исследование критических свойств модели антиферромагнетика  $MnF_2$  методами Монте-Карло // Изв. вузов. Физика. 2005. Т. 48, № 2. С. 53–58.
4. Муртазаев А.К., Магомедов М.А. Исследование модели анизотропного антиферромагнетика во внешнем магнитном поле // Журнал функциональных материалов. 2007. Т. 1, № 7. С. 261–264.
5. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. P. 361–364.
6. Efrem D'Sa J.B.C., Bhoje P.A., Priolkar K.R. at all. Low Temperature Neutron Diffraction Study of MnTe // cond-mat/0408124v1. URL: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0408124v1> (дата обращения: 18.03.2013).
7. Szuszkiewicz W., Dynowska E., Witkowska B. at all. Spin-wave measurements on hexagonal MnTe of NiAs-type structure by inelastic neutron Scattering // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. P. 104403.
8. De Jongh L.J., Miedema A.R. Experiments on simple magnetic model systems // Adv. Phys. 1974. Vol. 23, N 1. P. 1–260.
9. Ando K., Takahashi K., Okuda T. at all. Magnetic circular dichroism of zinc-blende-phase MnTe // Phys. Rev. B. 1992-I. Vol. 46, N 19. P. 12289–12297.
10. Аплеснин С.С., Рябинкина Л.И., Романова О.Б. и др. Влияние орбитального упорядочения на транспортные и магнитные свойства MnSe и MnTe // ФТТ. 2007. Т. 49, вып. 11. С. 1984–1989.
11. Аплеснин С.С., Романова О.Б., Горев М.В. и др. Синтез, структурные и магнитные свойства анион-замещенных халькогенидов марганца // ФТТ. 2012. Т. 54, вып. 7. С. 1296–1301.
12. Li-Fang Zhu, Bang-Gui Liu. Half-metallic ferrimagnet formed by substituting Fe for Mn in semiconductor MnTe // cond-mat/0811.2455v1. URL: <http://arxiv.org/abs/0811.2455v1> (дата обращения: 18.03.2013).
13. Li Y.B., Zhang Y.Q., Sun N.K. at all. Ferromagnetic semiconducting behavior of  $Mn_{1-x}Cr_xTe$  compounds // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 193308-1–193308-4.
14. Fleszar A., Potthoff M. and Hanke W. Electronic structure of zinc-blende MnTe within the GW approximation // cond-mat/0704.3967v1. URL: <http://arxiv.org/abs/0704.3967v1> (дата обращения: 18.03.2013).

15. *Binder K., Luijten E.* Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models // Phys. Rep. 2001. Vol. 344. P. 179-253.

*Поступила в редакцию 04.02.2013 г.  
Принята к печати 21.03.2013 г.*