

УДК 537.624.9

MSC2010 68Q87+68W01

© А. А. Кузин¹, А. А. Перетьяко¹, К. С. Солдатов^{1,2}, К. В. Нефедев^{1,2}

Разбавленный спиновый лед во внешнем магнитном поле

В работе представлены результаты исследования эффектов, возникающих под действием внешнего магнитного поля в разбавленных плоской и объемной системах спинового льда в модели спинов Изинга со взаимодействием ближайшего окружения. Мы исследовали системы спинов на $2D$ треугольной и кагоми-решетках, а также $3D$ -решетке пирохлора с помощью метода реплично-обменного Монте-Карло. В отсутствие разбавления наблюдаются только два плато — в зависимости от намагниченности внешнего поля для всех трех рассматриваемых типов решеток. Установлено существование пяти плато на кривых намагничивания разбавленной антиферромагнитной модели Изинга во внешнем поле [111] на треугольной решетке и решетке пирохлора. Для спинового льда на решетке кагоми наблюдалось семь плато. Показано, что причина возникновения плато связана с наличием критических полей реализации наиболее энергетически выгодных локальных конфигураций спинов в разбавленных моделях.

Ключевые слова: *Модель Изинга, метод Метрополиса, метод реплично-обменного Монте-Карло, решетка пирохлора, треугольная решетка, кагоми-решетка.*

1. Введение

Материалы спинового льда на протяжении уже более полувека привлекают большое внимание, см. работы [1–3] и ссылки в них. Причиной пристального внимания теоретиков к таким системам является физика геометрически фрустрированных материалов, которая, несомненно, представляет огромный интерес. Прототипами материалов спинового льда являются решетки пирохлора $Du_2Ti_2O_7$ и $Ho_2Ti_2O_7$. Эффекты магнитного поля в материалах спинового льда, которые заключаются в наличии плато, были исследованы теоретически [4–6] и экспериментально [7–10]. Новизна

¹ Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук, 690922, г. Владивосток, о. Русский, нп Аякс, 10

² Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, Радио, 7
Электронная почта: anton-ars@mail.ru (А. А. Кузин), peretiatko.aa@dvfu.ru (А. А. Перетьяко), soldatov_ks@students.dvfu.ru (К. С. Солдатов), nefedev.kv@dvfu.ru (К. В. Нефедев).

данной работы заключается в том, что мы не только получили новые интересные эффекты взаимовлияния внешнего магнитного поля и разбавления, но и нашли им объяснение.

В спиновых материалах ионы (Dy^{3+} или Ho^{3+}) образуют решетку пироклора. Локальное кристаллическое поле приводит к выстраиванию магнитных моментов вдоль воображаемых линий, связывающих центры двух тетраэдров с общей вершиной. Диспрозий и хольмий были выбраны потому, что эти вещества имеют самые большие магнитные моменты в природе. Это облегчает экспериментальное исследование материалов спинового льда с тетраэдрической структурой пироклора. В низкотемпературном состоянии конфигурации спинового льда подчиняются так называемому правилу спинового льда: два спина направлены «внутри» и два спина «наружу» для каждого тетраэдра решетки пироклора. Эта локальная спиновая конфигурация «2-внутри, 2-наружу» эквивалентна конфигурации протонов водорода в водяном льду [11].

Эффекты разбавления во фрустрированных системах изучались Ке и др. [12] для спин-лед-образных материалов. Магнитные ионы диспрозия Dy или хольмия Ho замещаются немагнитными ионами иттрия Y . Немонотонное поведение остаточной энтропии как функции концентрации разбавления наблюдалось экспериментально, дальнейшее изучение эффектов разбавления было доложено в [13–15].

В этой работе мы представляем результаты исследования разбавленной антиферромагнитной (АФМ) модели Изинга (учитывались только ближайшие соседи) на плоских $2D$ -решетках (треугольной и кагоми) и $3D$ решетке пироклора. Для решетки пироклора внешнее магнитное поле направлено вдоль кристаллографической оси [111]. В качестве метода численного моделирования мы использовали метод репличного обмена Монте-Карло [16], чтобы обойти замедление и застревание в конфигурациях локального минимума, которое обычно происходит при использовании алгоритма Метрополиса.

1.1. Решетки спинового льда

Один из вопросов, на который мы попытались найти ответ в данном исследовании, состоял в следующем: что происходит при намагничивании разбавленных антиферромагнитных систем спинов Изинга на двумерных и трехмерной фрустрированных решетках. Мы исследовали модель разбавленного антиферромагнетика Изинга в присутствии магнитного поля на треугольной и кагоми-решетках. Провели, посредством анализа локальных конфигураций спинов, анализ происхождения множественных плато для этих решеток.

Тетраэдрическую решетку пироклора можно рассматривать как чередующуюся последовательность кагоми- и треугольных слоев, которые эффективно разъединяются магнитным полем, ориентированным вдоль направления [111]. Спины в треугольных слоях фиксируются при приложении магнитного поля в этом направлении. Поведение спинов в слоях кагоми, которое иногда называют «кагоми-лед», представляет значительный интерес. Поэтому в данной работе исследовано поведение кривых намагничивания $2D$ -решеток кагоми и треугольной, а также $3D$ -решеток пирокло-

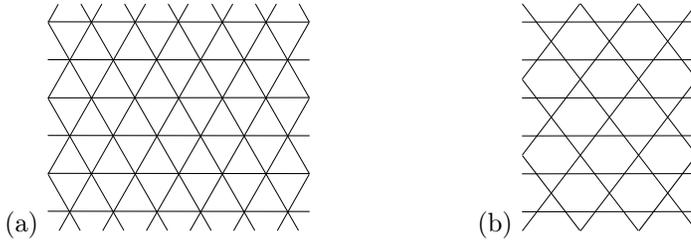


Рис. 1. Схематичное изображение: (a) треугольная решетка; (b) кагоми-решетка

ра в зависимости от внешнего магнитного поля и разбавления магнитных моментов вакансиями.

1.1.1. Треугольная и кагоми-решетки

Треугольная и кагоми-решетка представлены на рисунках 1a и 1b соответственно. Спины Изинга размещены в узлах решеток, расчеты произведены с учетом периодических граничных условий.

В данной работе энергия Зеемана выражается как $-\mathbf{h} \cdot \mathbf{d}_{k(i)}$, где $\mathbf{d}_{k(i)}$ есть единичный вектор каждого спина, который имеет проекцию на внешнее поле, значение проекции зависит от положения спина в решетке. Когда магнитное поле прикладывается вдоль $[111]$ направления, можно сказать, что $\mathbf{h} = h\mathbf{d}_0$, поэтому $\mathbf{h} \cdot \mathbf{d}_{k(i)}$ становится равным h для спинов, направление которых совпадает с $[111]$, т.е. для спинов $\mathbf{d}_{k(i)} = \mathbf{d}_0$, но $-(1/3)h$ для других спинов.

Исследование модели Изинга на треугольной решетке проводилось для антиферромагнитных систем спинов размером $L \times L$ с периодическими граничными условиями. В ходе численных экспериментов размеры варьировались, например, $L = 48 (N = 2304)$ и $L = 96 (N = 9216)$. Для решетки кагоми размером $L \times (3/2)L$ мы использовали $L = 48 (N = 3456)$ и $L = 96 (N = 13824)$. Концентрация разбавления x была $x = 0.0$ (без разбавления), 0.2 , 0.4 , 0.6 , и 0.8 . Мы отбросили первые $5 \cdot 10^3$ шагов метода Монте-Карло (MCSs), чтобы избежать неравновесных эффектов первоначальных конфигураций, и использовали последующие $5 \cdot 10^5$ MCSs для измерений и усреднения. Статистические ошибки оценивались путем расчета средних значений по 20 выборкам для каждого размера и каждого значения x .

1.1.2. Структура пирохлора

Тетраэдрическая структура пирохлора показана на рис. 2. Она представляет собой сетку тетраэдров с общими вершинами, так что каждый спин, находящийся в вершине тетраэдра, имеет шесть соседей. В расчетах учитывались периодические граничные условия — для исключения влияния эффекта границ.

Антиферромагнитная модель Изинга на решетке пирохлора описывается гамиль-

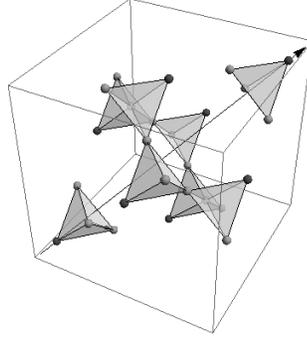


Рис. 2. Иллюстрация решетки пирохлора, которая является трехмерной сеткой тетраэдров с общими вершинами. Спины при вершинах $\mathbf{d}_{\kappa(i)} = \mathbf{d}_0$ показаны черным цветом, тогда как другие спины — серым

тонианом [6]:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{d}_{\kappa(i)} \sigma_i, \quad (1)$$

где $J(>0)$ есть константа обменного взаимодействия, σ_i — псевдоспины Изинга ($\sigma_i = \pm 1$), и суммирование по $\langle i,j \rangle$ означает, что сумма рассчитывается только по всем уникальным парам ближайших соседей.

Для системы спинов на решетке пирохлора единичные векторы $\mathbf{d}_{\kappa(i)}$ являются локальными направляющими векторами локальных легких осей решетки пирохлора, в явном виде записываются как $\mathbf{d}_{\kappa(i)} = \{\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$, где $\mathbf{d}_0 = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$, $\mathbf{d}_1 = (1, -1, -1)/\sqrt{3}$, $\mathbf{d}_2 = (-1, 1, -1)/\sqrt{3}$ и $\mathbf{d}_3 = (-1, -1, 1)/\sqrt{3}$. Мы рассматривали случай, когда магнитное поле \mathbf{h} направлено вдоль [111] направления, т.е. $\mathbf{h} = h\mathbf{d}_0$. Тогда $\mathbf{h} \cdot \mathbf{d}_{\kappa(i)}$ становится h для вершинных спинов, где $\mathbf{d}_{\kappa(i)} = \mathbf{d}_0$, но $-(1/3)h$ для других спинов. На рис. 2 спины при вершинах, $\mathbf{d}_{\kappa(i)} = \mathbf{d}_0$, показаны черным цветом, тогда как другие спины обозначены серым. Намагниченность M вдоль [111] направления вычисляется как

$$M = \sum_i \mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{d}_{\kappa(i)} \sigma_i. \quad (2)$$

В случае узлового разбавления спинов гамильтониан становится

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} c_i c_j \sigma_i \sigma_j - \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{d}_{\kappa(i)} c_i \sigma_i, \quad (3)$$

где c_i — замороженные переменные ($c_i = 1$ или 0) и концентрация вакансий x .

1.2. Реплично-обменный Монте-Карло метод

Монте-Карло-моделирование стало стандартным методом изучения задач многих тел в физике. Метод Метрополиса получил широкое распространение в различных науках. Однако при его использовании иногда возникает проблема замедления

вычислений. Метод репличного обмена Монте-Карло, его еще называют в зарубежной литературе «параллельный отжиг» (parallel tempering method) [16, 17], позволяет преодолеть эти проблемы. Метод репличного обмена был успешно применен к проблеме спиновых стекол [18]. Идея репличного обмена объединила молекулярную динамику и методы решения проблемы фолдинга протеина [19]. Рассмотрим две

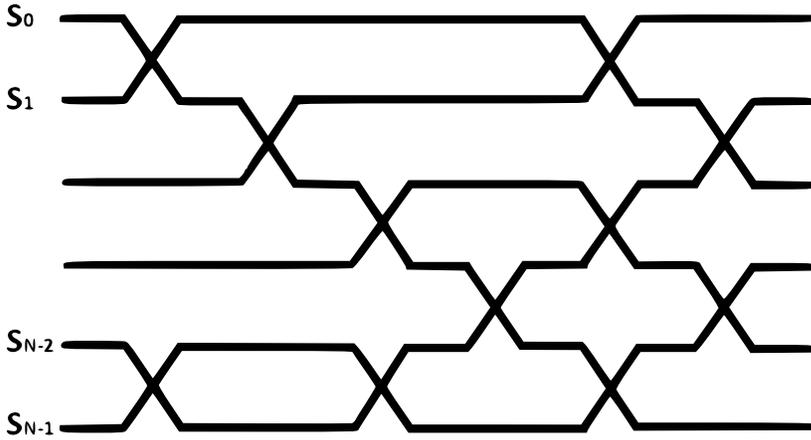


Рис. 3. Схематичное изображение динамики репличного обмена в зависимости от числа шагов по методу Монте-Карло.

реплики системы. Если обратная температура первой реплики равна β_1 и второй реплики β_2 , вес Больцмана такой сложной системы - $\exp[-(\beta_1 E_1 + \beta_2 E_2)]$, где E_1 и E_2 есть энергии каждой системы. В ходе семплирования производится обмен репликами системы. Другими словами, происходит обмен конфигурациями, который реализуется с помощью Монте-Карло-метода при известной условной вероятности перехода. Значение вероятности представляет собой величину, равную относительному весу Больцмана,

$$\exp[-(\beta_1 E_1 + \beta_2 E_2) + (\beta_1 E_2 + \beta_2 E_1)] = \exp[-(\beta_1 - \beta_2)(E_1 - E_2)].$$

Здесь E_1 и E_2 суммарные энергии двух реплик. Заметим, что для вычисления вероятности обмена репликами не обязательно использовать обратные температуры β_i . Можно также применить обмен конфигурациями, используя несколько различных значений модуля магнитного поля. Когда мы обмениваем конфигурации, взяв для вычисления вероятности магнитные поля h_1 и h_2 , вес Больцмана становится

$$\exp[-\beta(h_1 E_2^{(Z)} + h_2 E_1^{(Z)}) + \beta(h_1 E_1^{(Z)} + h_2 E_2^{(Z)})] = \exp[\beta(h_1 - h_2)(E_1^{(Z)} - E_2^{(Z)})],$$

где $hE^{(Z)}$ — энергия Зеймана.

Число реплик может быть очень большим, в частности, для численного расчета термодинамики системы спинов на решетке пирохлора использовались 19044 реплики. Для семплирования системы пирохлора мы использовали 138 реплик и 46 магнитных полей, 3 температуры одновременно.

2. Результаты и обсуждение

2.1. Двумерные решетки

2.1.1. Намагниченность треугольной решетки спинов

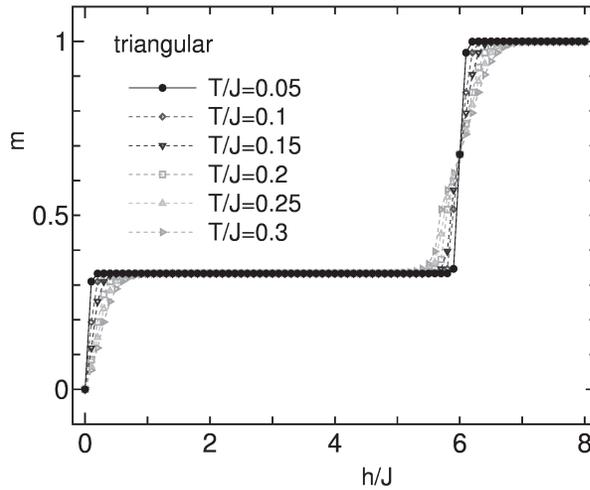


Рис. 4. Кривая намагничивания для АФМ модели Изинга на треугольной решетке

Рассмотрим сначала результаты, полученные для треугольной решетки. Усредненные значения намагниченности $m = M/N$, где $M = \sum_i \sigma_i$ для чистой модели ($x = 0.0$), изображены на рис. 4 как функция приложенного поля h в единицах J . Размер системы $L = 96$ ($N = 9216$). Температуры $T/J = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25$ и 0.3 . Средние значения были рассчитаны более чем по 20 выборкам с различными последовательностями случайных чисел. Статистические ошибки меньше размера меток. Зависимость от размера системы средних термодинамических значений относительно мала для достаточно больших размеров, таких как $L = 48$ и $L = 96$. Мы видим плато $m = 1/3$ при $h/J < 6$, и скачок становится более плавным с повышением температуры. На рис. 5 показаны пропорции типов спиновых конфигураций в треугольнике для АФМ модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле. Для $L = 96$ имеется 18432 треугольника, а пропорции типов спиновых конфигураций измерены для 50 000 MCS. Бары ошибок оценивались путем усреднения результатов более чем по 20 независимым выборкам. Тип данных спиновых конфигураций характеризовался числом спинов вверх (+1) и вниз (-1) в треугольнике. Существует четкий переход от 2-вверх-1-вниз-конфигурации к 3-вверх-0-вниз-конфигурации при $h/J = 6$. Этот переход становится более плавным с повышением температуры. Кривая намагничивания для разбавленной модели Изинга АФМ на треугольной решетке приведена на рис. 6. Размер системы $L = 96$ ($N = 9216$), и температура $T/J = 0.05$. Концентрации разбавления (x) составляют 0.0, 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8. Средние значения

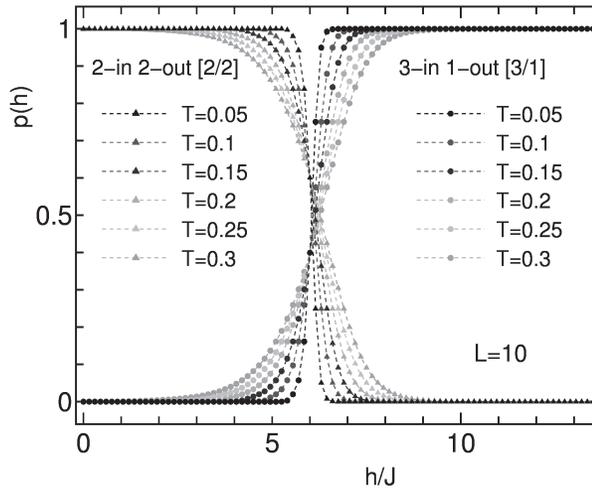


Рис. 5. Соотношение типов спиновых конфигураций в треугольнике для АФМ модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле.

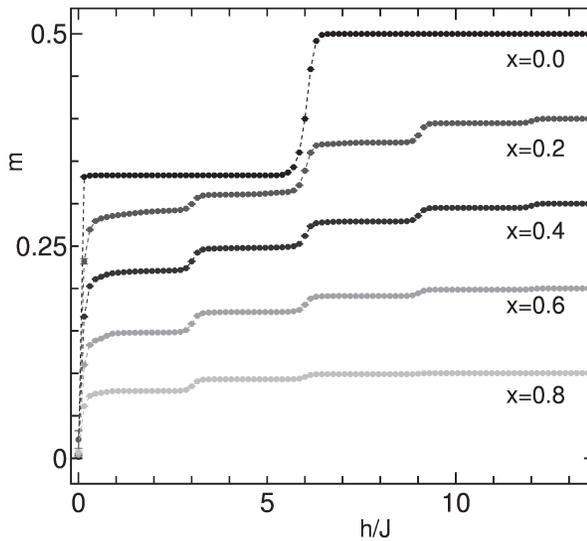


Рис. 6. Кривая намагничивания для разбавленной антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке. Размер системы $L = 96$ ($N = 9216$) и температура $T/J = 0.05$. Концентрация разбавления (x) была 0.0, 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

были рассчитаны более чем по 20 случайным выборкам. Бары ошибок на рисунке меньше размера меток. Статистические ошибки, полученные путем усреднения по 20 случайным выборкам, становятся очень маленькими, когда размер системы достигает $L=96$ ($N=9216$).

Мы наблюдаем семь плато на кривой намагниченности разбавленных систем; для $h/J < 1$, $1 < h/J < 2$, $2 < h/J < 3$, $3 < h/J < 4$, $4 < h/J < 5$, $5 < h/J < 6$ и $h/J > 6$. Напротив, чистый случай показывает только два плато, расположенных по обе стороны от $h/J=6$. Результаты показаны для $T/J=0.05$. При более высоких температурах магнитный шаг между плато становится более плавным. Намагниченность m насыщается при $(1-x)$. В более раннем исследовании модели разбавленной треугольной АФМ решетки Изинга в магнитном поле Яо [20] получил кривую намагничивания для разбавленной системы, применив метод Ванга Ландау. Жуковиц и др. [21] использовали теорию эффективного поля для изучения разбавленной АФМ модели Изинга. В обоих исследованиях сообщалось о множественных плато.

В случае чистой модели спиновая конфигурация треугольника изменяется при переходе от 2-вверх-1-вниз-конфигурации к 3-вверх-0-вниз-конфигурации при приложении магнитного поля. Наоборот, конфигурация спинов в разбавленных системах становится более сложной. Зависимость спиновой конфигурации от магнитного поля приведена на рис. 7 для системного размера $L=96$ ($N=9216$) и температуры $T/J=0.05$. Концентрации разбавления (x) составляют 0.2 и 0.4. Усреднение было выполнено по 20 случайным образцам. Есть 18432 треугольника для $L=96$, а число спинов в треугольнике n становится $n=3, 2, 1$ или 0 для разбавленных систем.

Верхняя панель на рис. 7 соответствует $n=3$. Для $x=0.2$ количество треугольников с $n=3$ составляет примерно 51% от общего числа треугольников, для $x=0.4$ количество треугольников с $n=3$ составляет примерно 22% от общего числа треугольников. Переход от 2-вверх-1-вниз конфигурации, $[2/1]$, к 3-вверх-0-вниз конфигурации, $[3/0]$, наблюдается при $h/J=6$, как в чистом случае. Тем не менее пропорции $[2/1]$ и $[3/0]$ в общем числе конфигураций также изменяются при $h/J=1, 2, 3, 4$ и 5. Для области с низким h конфигурация 1-вверх 2-вниз, $[1/2]$, остается.

Средняя панель на рис. 7 соответствует $n=2$. Один спин удаляется из треугольника. Наблюдается частичный переход от 1-вверх-1-вниз-конфигурации, $[1/1]$, к 2-вверх-0-вниз-конфигурации $[2/0]$.

Нижняя панель на рис. 7 соответствует $n=1$. Здесь из треугольника удаляются два спина. При $h/J=0$ имеются равные доли спинов вверх и спинов вниз, тогда как доля спинов выстраивающихся по полю увеличивается с увеличением магнитного поля h .

Мы показали данные пропорции типов спиновых конфигураций в треугольнике для $x=0.2$ и $x=0.4$ на рис. 7. Мы видим, что существует зависимость (x). Ситуация, по сути, одна и та же, хотя пропорции конфигураций с меньшими значениями n возрастают с увеличением x . Для сильного разведения, например, $x=0.8$, появляется много свободных спинов, которые не создают плато намагничивания. Скачок намагниченности уменьшается при увеличении x . Чтобы выяснить происхождение семи плато на кривой намагничивания для треугольной решетки, мы исследуем локальную энергию спиновой конфигурации в треугольнике при $n=3, 2$ и 1, результаты

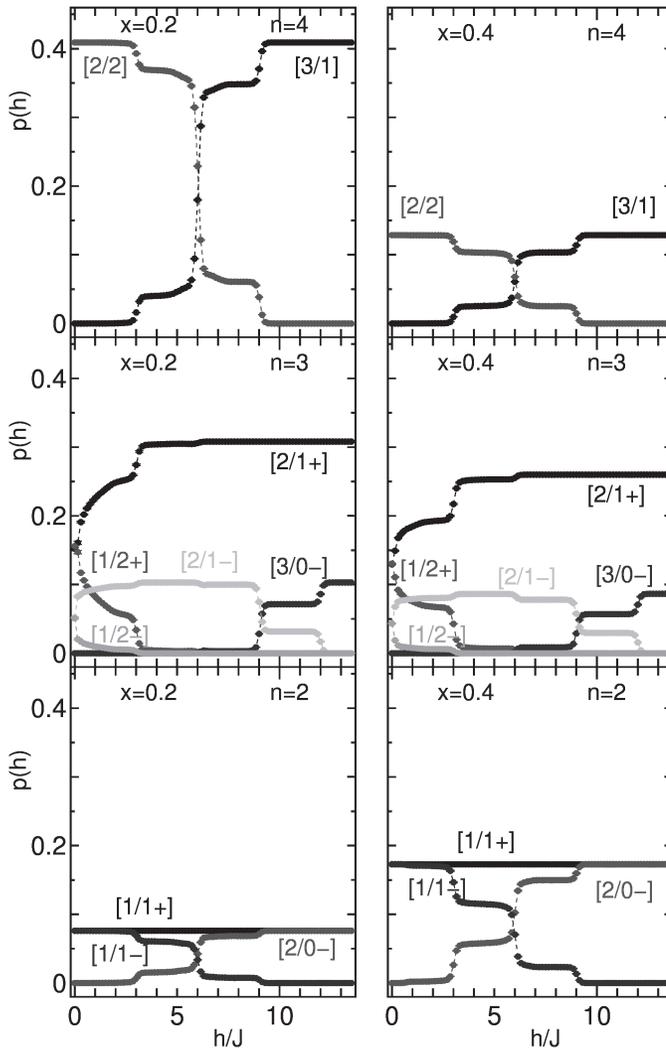


Рис. 7. Пропорции типов спиновых конфигураций в треугольнике для разбавленной АФМ модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле. Размер системы $L = 96$ ($N = 9216$), а температура $T/J = 0.05$. Концентрации разбавления (x) составляют 0.2 (слева) и 0.4 (справа). Число спинов n в треугольнике равно 3, 2 и 1 для верхней, средней и нижней панели соответственно.

исследования приведены в табл. 1. Локальная энергия для каждой конфигурации приведена в последнем столбце. Край, связанный с обменной энергией, разделяется двумя соседними треугольниками, а угол, связанный с зеемановской энергией, разделяется шестью треугольниками.

Мы рассматриваем энергию шести треугольников с общей вершиной. На рис. 8

Таблица 1. Локальная энергия спиновой конфигурации в треугольнике для треугольной решетки.

Конфигурация	n спинов	вверх	вниз	энергия
[3/0]	3	3	0	$3(J/2) - 3(h/6)$
[2/1]		2	1	$-(J/2) - (h/6)$
[1/2]		1	2	$-(J/2) + (h/6)$
[2/0]	2	2	0	$(J/2) - 2(h/6)$
[1/1]		1	1	$-(J/2)$
[1/0]	1	1	0	$-(h/6)$
[0/1]		0	1	$+(h/6)$

схематично показан процесс переключения. Удаленные спины обозначаются пустым кружком. Случай, когда все шесть треугольников имеют $n = 3$, показан на панели (i). Когда общий спин поворачивается с «вниз» на «вверх», конфигурация меняется с [2/1] на [3/0]. Из табл. 1 видно, что критическое магнитное поле рассчитывается по формуле

$$-(J/2) - (h/6) = 3(J/2) - 3(h/6).$$

Мы получили $h_c/J = 6$. Если один спин удален, как на панели (ii), есть четыре треугольника с $n = 3$ и два треугольника с $n = 2$. Когда общий спин поворачивается от «вниз» до «вверх», конфигурация меняется с $(4[2/1] + 2[1/1])$ до $(4[3/0] + 2[2/0])$. Из таблицы 1 видно, что переходное магнитное поле рассчитывается по формуле

$$4(-(J/2) - (h/6)) + 2(-(J/2)) = 4(3(J/2) - 3(h/6)) + 2((J/2) - 2(h/6)).$$

Мы получили $h_c/J = 5$. Удаление двух спинов заставляет рассмотреть два случая: во-первых, изменение от $(3[2/1] + 2[1/1] + [0/1])$ до $(3[3/0] + 2[2/0] + [1/0])$, как показано на панели (iii), а во-вторых, изменение от $(2[2/1] + 4[1/1])$ до $(2[3/0] + 4[2/0])$, как показано на панели (iv). В обоих случаях переходное магнитное поле $h_c/J = 4$. Случаи, когда три спина удалены, показаны на панелях (v), (vi) и (vii), тогда как те, где четыре спина удалены, показаны на панелях (viii) и (ix). Панель (x) связана с удалением пяти спинов. Переходные значения h_c , данные на рис. 8, могут быть получены таким же образом. Это исследование явно показывает изменение конфигураций, представленных на рис. 7, который позволяет прояснить происхождение семи плато намагниченности, изображенных на рис. 6. Ступенчатое поведение намагниченности при $h/J = 6$ возникает из-за ситуации показанной на рис. 8(i). При увеличении концентрации разбавления x происходит переход от высокоэнергетических конфигураций спинов к низкоэнергетическим.

2.1.2. Решетка кагоми

Далее рассмотрим решетку кагоми. На рис. 9 изображена намагниченность $m = M/N$ для неразбавленной модели ($x = 0.0$) как функция от прикладываемого внешнего магнитного поля h . Размер системы $L = 96$ ($N = 13824$), рассматриваемые температуры $T/J = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, \text{ и } 0.3$. Величина статистической ошибки

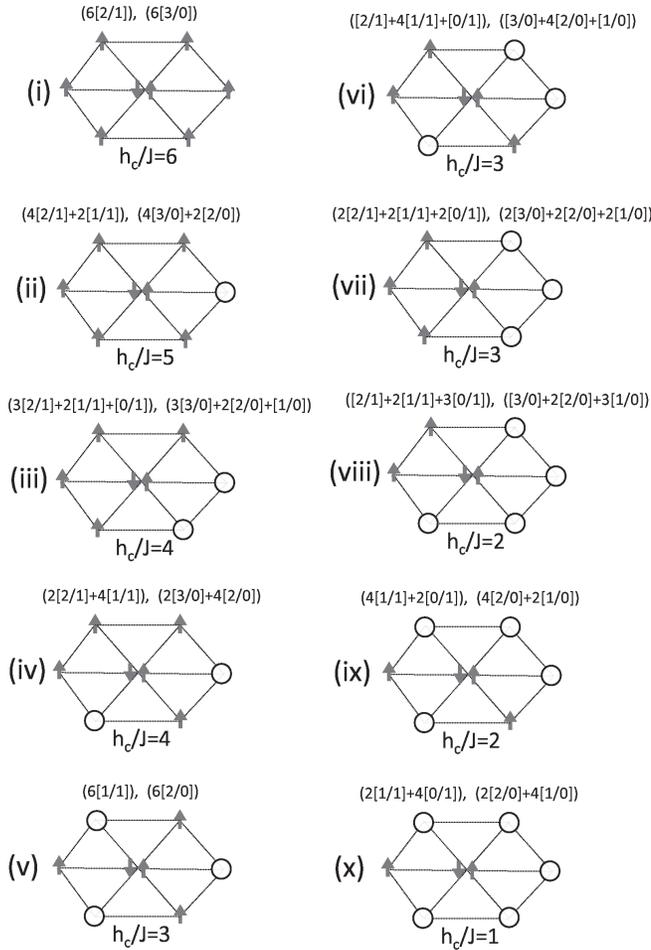


Рис. 8. Схематическая иллюстрация переворота спина для треугольной решетки. Спины вверх и вниз обозначаются стрелкой, тогда как удаленные спины обозначаются пустым кружком. Дано критическое значение h_c .

находится в пределах знаков на графике, для её оценки было выполнено 20 независимых вычислений. Плато, соответствующее $m=1/3$, появляется при $h/J < 4$, однако с увеличением температуры переход становится более плавным. На рис. 10 изображено соотношение различных спиновых конфигураций в треугольниках решетки кагоми для антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле, где размер системы $L=96$ соответствует 9216 треугольникам.

Переход между 2-вверх-1-вниз- к 3-вверх-0-вниз-конфигурациям наблюдается при $h/J=4$. Кривая намагниченности для разбавленной антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоми изображена на рис. 11. Размер системы $L=96$ ($N=13824$), температура $T/J=0.05$, рассматриваемые степени разбавления ($x=0.0$,

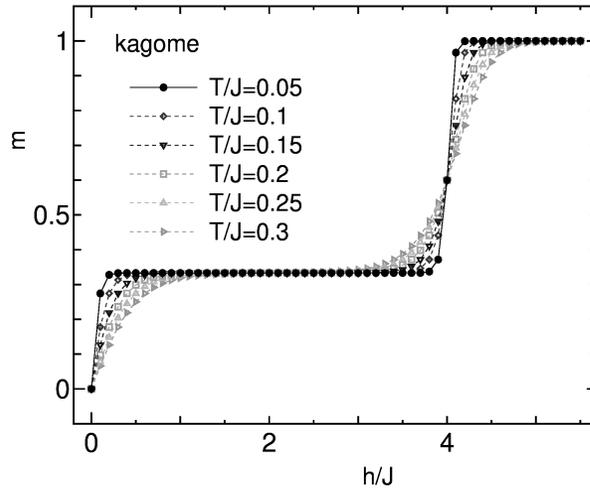


Рис. 9. Кривая намагниченности для антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоми.

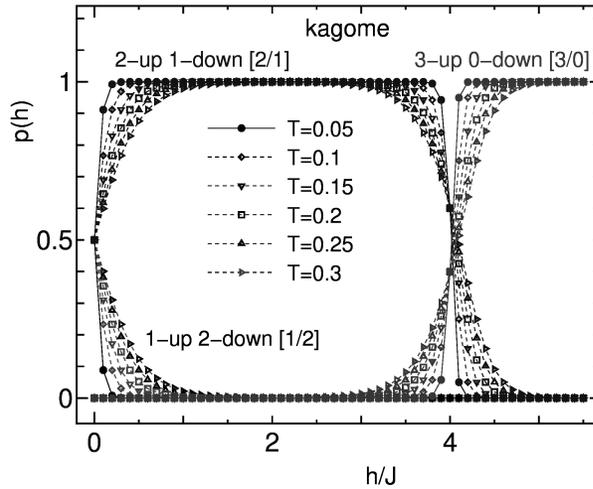


Рис. 10. Соотношение спиновых конфигураций в треугольниках решетки кагоми для антиферромагнитной модели Изинга в магнитном поле. Размер системы $L = 96$ ($N = 13824$), рассматриваемые температуры $T/J = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25$, и 0.3 .

0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

На кривой намагниченности наблюдается пять различных плато на участках $h/J < 1$, $1 < h/J < 2$, $2 < h/J < 3$, $3 < h/J < 4$, и $h/J > 4$, что является существенным отличием по сравнению с кривой для неразбавленной модели, на которой наблюдаются лишь два плато по обе стороны от $h/J = 4$. Зависимость спиновых конфигураций от

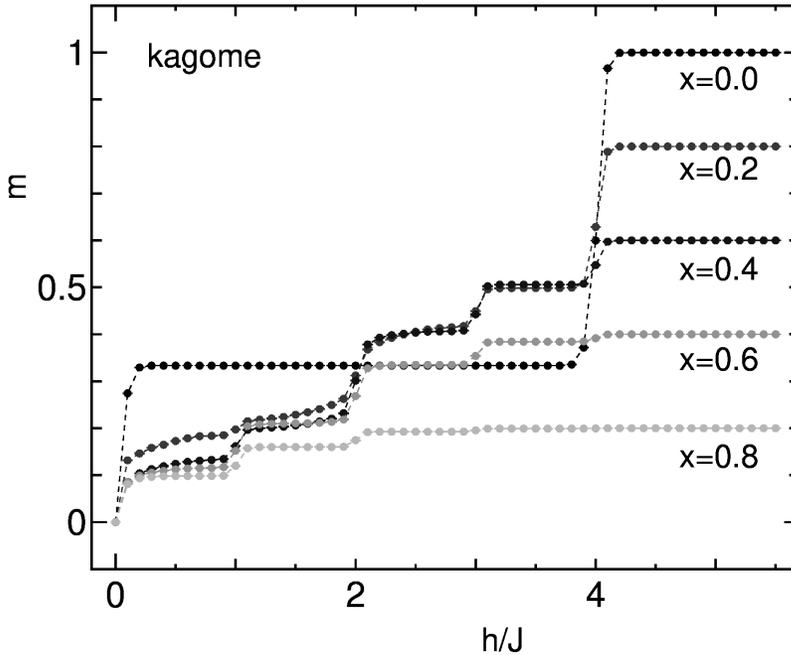


Рис. 11. Кривая намагниченности для разбавленной антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоми.

магнитного поля изображена на рис. 12. Размер рассматриваемой системы $L = 96$ ($N = 13824$), температура $T/J = 0.05$, степени разбавления (x) = 0.2 и 0.4. В данном случае $L = 96$ также соответствует 9216 треугольникам и число спинов в треугольнике n , становится равным 3, 2, 1, или 0 для разбавленных систем, в зависимости от степени разбавления.

Верхняя часть рис. 12 отображает результат для $n=3$, что соответствует приблизительно 51% от всех треугольников при $x=0.2$ и приблизительно 22% при $x=0.4$. Абсолютный переход от спиновой ориентации $[2/1]$ (2-вверх, 1-вниз) к ориентации $[3/0]$ (3-вверх, 0-вниз) наблюдается при $h/J = 4$, как и в случае рассмотрения неразбавленной модели. Тем не менее соотношение между $[2/1]$ и $[3/0]$ конфигурациями изменяется также при $h/J = 1, 2$, и 3.

Средняя часть рис. 12 соответствует $n=2$. Наблюдается частичный переход от $[1/1]$ конфигурации (1-вверх 1-вниз), к $[2/0]$ конфигурации (2-вверх, 0-вниз).

Нижняя часть изображения соответствует $n=1$. При $h/J = 0$ число спинов с ориентацией «вверх» равно числу спинов, ориентированных «вниз». С увеличением

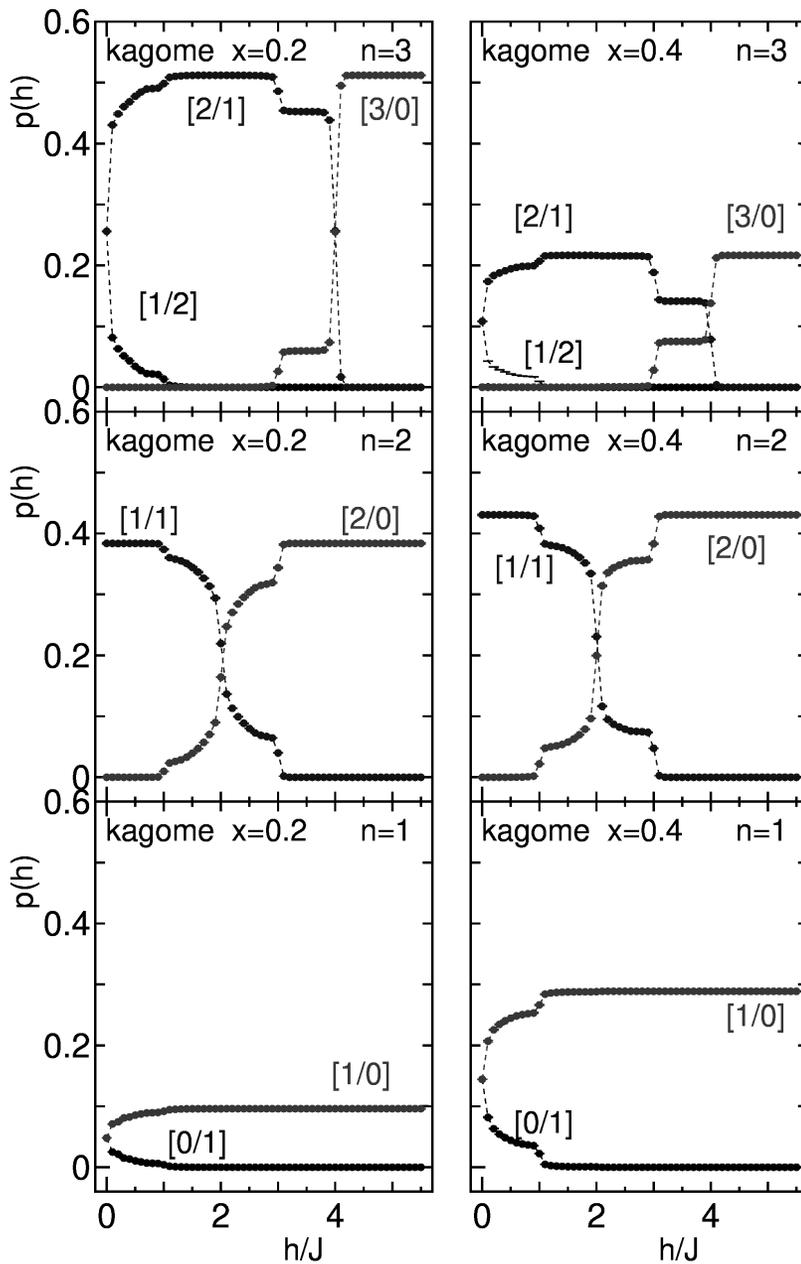


Рис. 12. Относительное число возможных спиновых конфигураций в треугольниках разбавленной антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоми под влиянием внешнего магнитного поля.

h возрастает доля спинов, направленных «вверх». Анализ, объясняющий природу возникновения пяти различных плато кривой намагниченности (рис. 11), является открытой темой для дальнейшего исследования.

2.2. Спиновый лед на решетке пирохлора

Интерес представляет исследование поведения намагниченности и анализ причин, которые приводят к существованию нескольких ступеней на кривой намагничивания для разбавленной модели спинового льда с взаимодействием ближайших соседей спинов Изинга на трехмерной (3D) решетке пирохлора. Для моделирования АФМ модели Изинга на решетке пирохлора мы использовали 16-узельную кубическую элементарную ячейку на решетке пирохлора и системы размером $L \times L \times L$ элементарных ячеек с периодическими граничными условиями [22]. Моделирование производилось для систем, размеры которых были $L = 6, 8$ и 10 ; число узлов было $N = 3456, 8192$ и 16000 соответственно. Концентрации разбавления (x) выбирались $x = 0.0$ (не разбавленный), $0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 . Усреднение производилось по 10 образцам для каждого размера и каждого x . Первые 10000 шагов выполненных по методу Монте-Карло (MCS) не учитывались, для того чтобы обойти эффекты начальных конфигураций, и следующие 100 000 MCS использовались для измерений.

2.2.1. Чистый образец

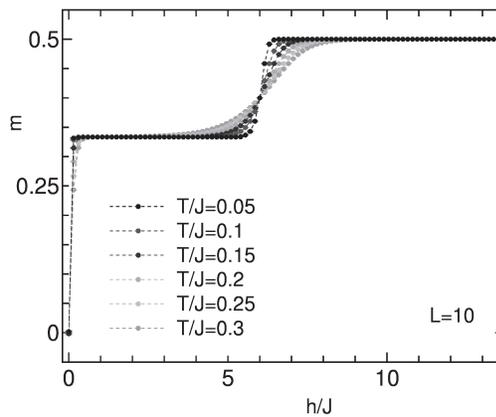


Рис. 13. Кривая намагниченности для АФМ модели Изинга на решетке пирохлора. Магнитное поле прикладывается в $[111]$ направлении. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$), и температура $T = 0.1, 0.2$ и 0.3 .

На рис. 13 намагниченность $m = M/N$ изображена как функция приложенного поля h в единицах J . Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$). Температуры $T = 0.1, 0.2$ и 0.3 в единицах J . Среднее значение было взято по 10 образцам. Бары ошибок меньше, чем размер значков на графике. Размер $L = 10$ является достаточно большим; зависимость термодинамических средних от размера небольшая. В ходе вычислений

подтвердились два плато для кривых намагниченности; в первом энтропия основного состояния уменьшается, но все еще остается экстенсивной величиной [5,6]. Высота первого плато составляет $m = 1/3$, второго $m = 1/2$ при $h = 6$, и прыжок становится более сглаженным при увеличении температуры. Отношение типов спиновых кон-

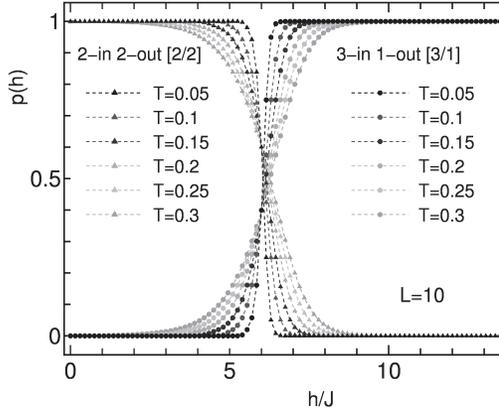


Рис. 14. Относительные типы конфигураций в тетраэдре для АФМ модели Изинга на решетке пирохлора во внешнем магнитном поле. Магнитное поле в направлении [111]. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$), и температуры $T = 0.1, 0.2$ и 0.3 .

фигураций тетраэдра для АФМ модели Изинга на решетке пирохлора в магнитном поле изображено на рис. 14. Магнитное поле было приложено в направлении [111]. Есть 8000 тетраэдров для $L = 10$, и доля типов спиновых конфигураций была измерена на 100000 MCS. В среднем получено более 10 независимых выборок для оценки погрешности. Ясно видны изменения от конфигураций 2-внутри 2-наружу к конфигурациям 3-внутри 1-наружу при $h = 6$. Изменения становятся более гладкими при температурах более высоких.

2.2.2. Разбавление

Далее мы рассмотрим результаты, полученные для разбавленных трехмерных спиновых антиферромагнитных систем. На рис. 15 изображена намагниченность для разбавленных АФМ-решеток пирохлора. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$) и температура $T = 0.1$. Разбавленная концентрация $(x) = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 . Среднее значение было взято по 10 случайным образцам. Размер баров ошибки также показан на рис. 15, но он оказался меньше значков, которыми обозначены точки. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$).

Мы наблюдаем пять плато в намагниченности разбавленных систем; для $h < 3$, $3 < h < 6$, $6 < h < 9$, $9 < h < 12$ и $h > 12$ в единицах J . Это контрастирует с со случаем чистой системы, где только два плато разделены при значении поля $h = 6$. Мы приводим результаты для $T = 0.1$; если температура увеличивается, шаги по полю становятся более гладкими. Заметим, что значение намагниченности насыщения m

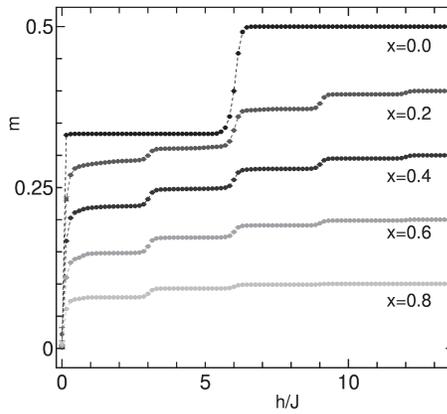


Рис. 15. Кривые намагниченности для разбавленной AFM модели Изинга на решетке пирохлора. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$), и температура $T = 0.1$. Концентрации разбавления ($x =$) 0.0, 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

равно $(1/2)*(1-x)$. В случае чистой модели спиновые конфигурации тетраэдра изменяются от 2-внутри-2-наружу-конфигураций к 3-внутри-1-наружу-конфигурациям, когда магнитное поле прикладывалось в направлении $[111]$. В случае разбавленных систем спиновые конфигурации становятся более сложными. Влияние спиновых конфигураций тетраэдра в зависимости от значения магнитного поля изображена на рис. 16. Размер системы $L = 10$ ($N = 16000$) и температура $T = 0.1$. Концентрация разбавления (x)=0.2. Усреднение выполнялось по 10 случайным образцам. Есть 8000 тетраэдров для $L = 10$, и количество спинов в тетраэдре, n , становится 4, 3, 2, 1 или 0 для разбавленных систем.

Верхний рис. 16 это рисунок для числа спинов $n=4$. Количество спинов $n=4$ для примерно 41% тетраэдров при $x=0.2$. Изменения от 2-внутри-2-наружу конфигурации, $[2/2]$, к конфигурации 3-внутри-1-наружу, $[3/1]$, наблюдается также при $h=6$, как и в чистом случае. Однако пропорции $[2/2]$ и $[3/1]$ также изменяются при $h=3$ и при $h=9$.

Средний рис. 16 демонстрирует зависимость относительного числа конфигураций при $n=3$. Существует две возможности удалить вершинный спин, находящийся в черной вершине (111) , или удалить другой спин. Когда вершинный спин не удаляется, изменения от 2-внутри-1-наружу конфигурации, $[2/1+]$, к 1-внутри-2-наружу конфигурации, $[1/2+]$ наблюдаются. При удалении черного спина наблюдаются изменения от 2-внутри-1-наружу конфигурации, $[2/1-]$, к 3-внутри-0-наружу конфигурации, $[3/0-]$. Для малых полей h , 1-внутри-2-наружу конфигурация, $[1/2-]$, остается неизменной.

Нижний график рис. 16 есть график числа спинов $n=2$. Два спина удаляются из тетраэдра. Если вершинный спин не удаляется, то 1-внутри-1-наружу конфигурация, $[1/1+]$, является стабильной. Когда вершинный спин удаляется, происходит изменение от 1-внутри-1-наружу конфигурации, $[1/1-]$, к конфигурации

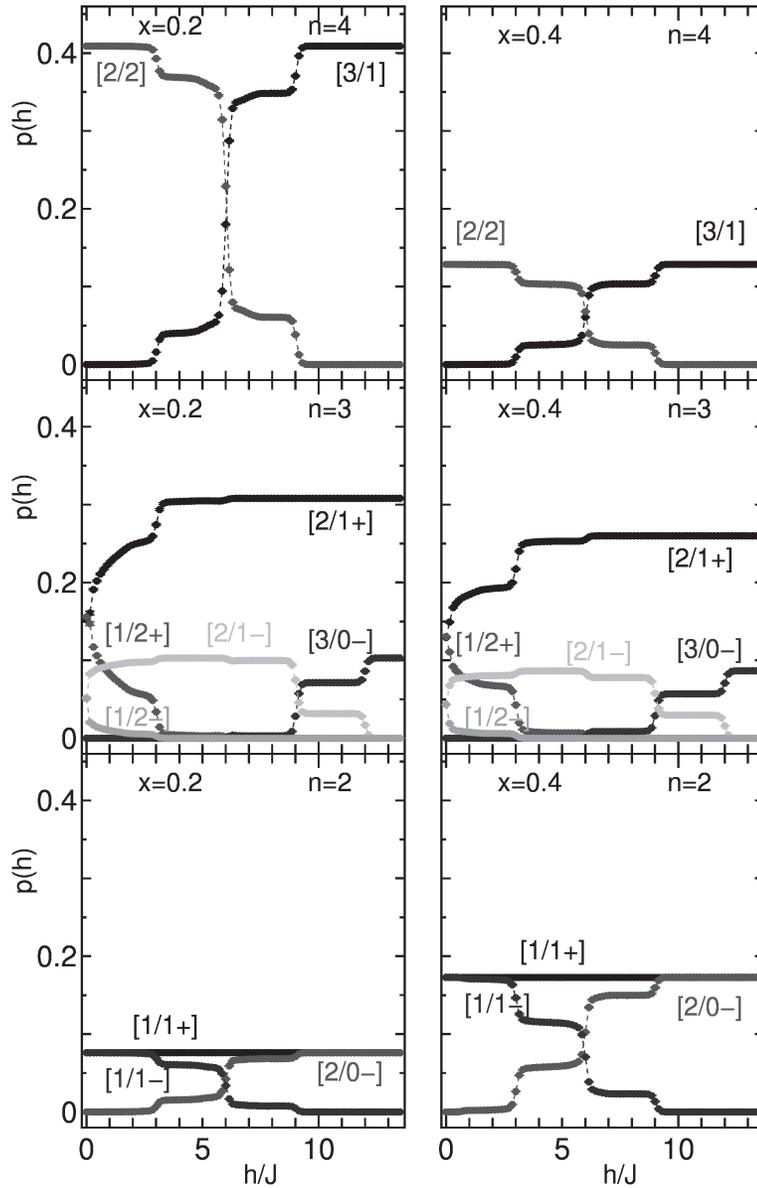


Рис. 16. Отношение типов конфигураций тетраэдра для разбавленной АФМ модели Изинга на решетке пирохлора под влиянием внешнего магнитного поля в направлении $[111]$. Система размером $L = 10$ ($N = 16000$), и при температуре $T = 0.1$. Концентрация разбавления (x) = 0.2. Число спинов n в тетраэдре 4, 3 и 2 сверху вниз на рисунках соответственно.

Таблица 2. Локальные энергии спиновых конфигураций тетраэдра для спинов $n = 4, 3, \text{ и } 2$.

конфигурации	n (спины)	вершинный	«внутри»	«наружу»	энергия
[3/1]	4	1	3	0	$-6(h/6)$
[2/2]		1	2	1	$-2J - 4(h/6)$
[2/1+]	3	1	2	0	$-J - 5(h/6)$
[1/2+]		1	1	1	$-J - 3(h/6)$
[3/0-]		0	3	0	$3J - 3(h/6)$
[2/1-]		0	2	1	$-J - (h/6)$
[1/2-]		0	1	2	$-J + (h/6)$
[1/1+]	2	1	1	0	$-J - 4(h/6)$
[2/0-]		0	2	0	$J - (h/6)$
[1/1-]		0	1	1	$-J$

2-внутри-0-наружу, [2/0-]. Изменение высоты плато наблюдается от $h = 3$ до $h = 9$.

2.2.3. Происхождение магнитного плато

Теперь исследуем локальные энергии спиновых конфигураций тетраэдра для числа спинов $n = 4, 3$ и 2 , которые табулируются и представляются в таблице 2. Вершинные спины фиксированы как «наружу», когда магнитное поле прикладывается вдоль [111] направления. Сумма спинов с направление «внутри» и «наружу» и других спинов есть $n-1$, в случае когда спины в вершинах не удаляются, при удалении спинов сумма будет равна n . Локальная энергия для таких конфигураций дается в последней колонке. Рассмотрим энергию двух тетраэдров с общим спином. Рассчитаем энергию двух тетраэдров с общей вершиной. На рис. 17 схематично проиллюстрирован процесс обращения спина. Вершинные спины обозначены черной стрелкой, тогда как другие спины серыми. Мы обозначили $\mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{d}_{\kappa(i)} = 1$ для черных спинов, тогда как $-1/3$ для других спинов. Удаленные спины обозначаются пустыми кружками. Случай, когда два тетраэдра $n = 4$, показан на рис. 17(i). Когда общий спин поворачивается из положения «наружу» в положение «внутри», конфигурация изменяется от $([2/2]+[2/2])$ к $([3/1]+[3/1])$. В табл. 2 видно, что переход в магнитном поле вычисляется при

$$2(-2J - 4(h/6)) = 2(-6(h/6)).$$

Тогда мы получим $h_c/J = 6$. Случай, когда взяты два тетраэдра $n = 4$ и $n = 3$, показан на рис. 17(ii) и рис. 17(iii). Когда спин в вершине поворачивается из положения «наружу» в положение «внутри», конфигурация изменяется от $([2/2]+[1/2+])$ к $([3/1]+[2/1+])$ на рис. 17(ii). В табл. 2 видно, что критическое значение магнитного поля вычисляется

$$(-2J - 4(h/6)) + (-J - 3(h/6)) = (-6(h/6)) + (-J - 5(h/6)).$$

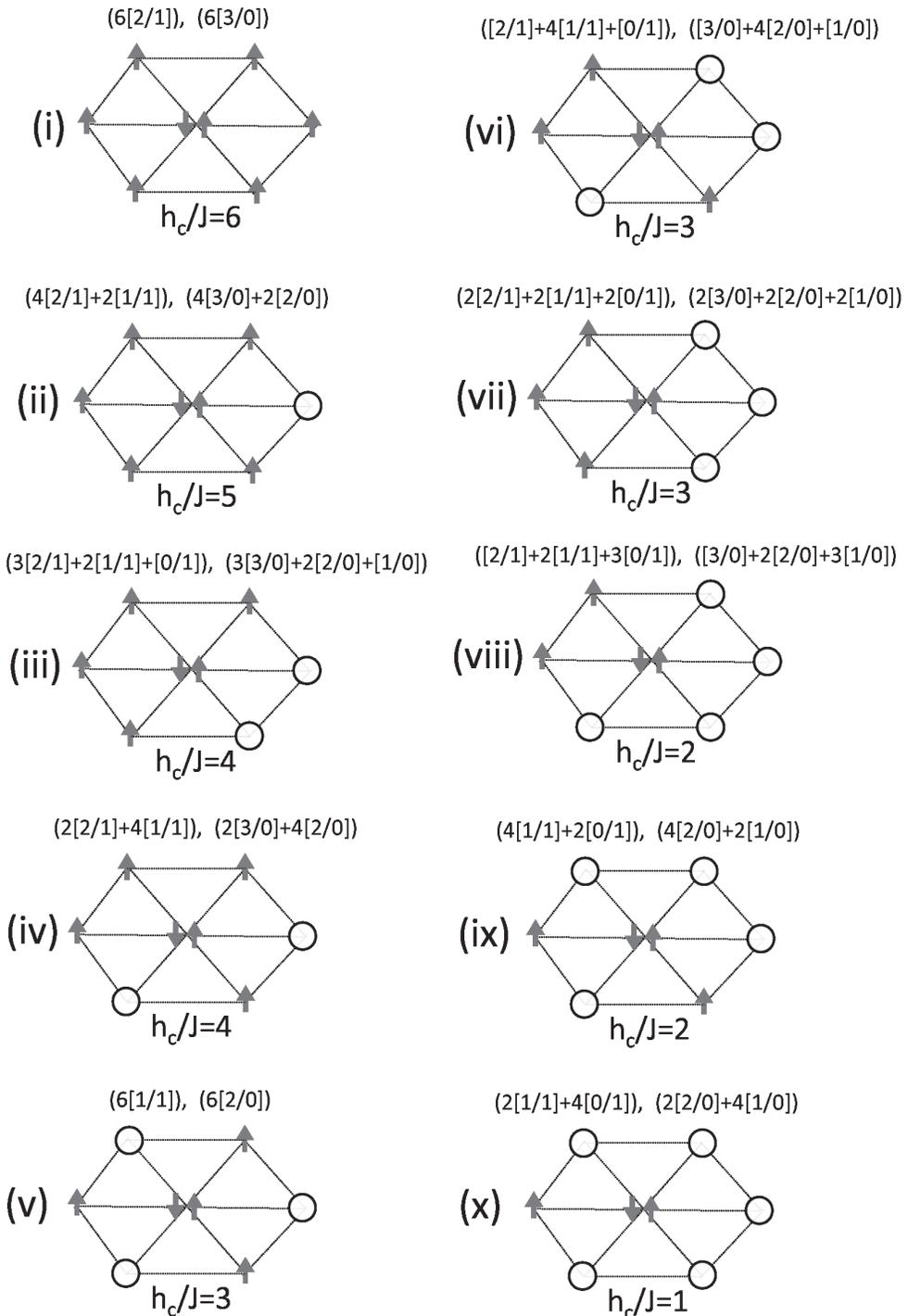


Рис. 17. Схематичная иллюстрация обращения спинов для тетраэдров с общей вершиной. Спины обозначаются стрелками. Удаленный спин обозначен пустым кружком. Случай двух тетраэдров $n = 4, 3, 2$ показан на схеме (i) ~ (viii). Переход происходит при значениях поля h_c , которые приводятся под каждой конфигурацией.

Получили $h_c/J = 3$. Аналогично рассмотрение приводит к $h_c/J = 9$ для изменения от $([2/2] + [2/1-])$ к $([3/1] + [3/0-])$ в 17(iii) из уравнения

$$(-2J - 4(h/6)) + (-J - (h/6)) = (-6(h/6)) + (3J - 3(h/6)).$$

Случай $n=3$ показан на рис. 17(iv) и рис. 17(v). Случай, когда рассматриваются два тетраэдра для $n=4$ и $n=2$, показан на рис. 17(vi). Случаи для $n=3$ и $n=2$ показаны на рис. 17(vii) и рис. 17(viii). Критические значения h_c получены таким же путем, как и ранее, и представлены на рис. 17.

Это исследование естественным образом позволяет рассчитать изменения конфигураций, представленных на рис. 16, которые объясняют пять плато на рис. 15.

Мы показали данные для $x = 0.2$. Для других концентраций x ситуация будет точно такой же.

3. Выводы

Резюмируем сказанное. Мы исследовали разбавленные АФМ модели Изинга на треугольной и кагоми-решетках в магнитном поле с использованием метода репликального обмена Монте-Карло, для вычисления средних температуры и магнитного поля. В полученных кривых намагниченности мы наблюдали *семь* плато для треугольной решетки и *пять* плато для кагоми-решетки. Эти результаты контрастируют со случаем, чистая модель, которая отображает только два плато в треугольной и кагоми-решетках. Исследована спиновая конфигурация в треугольниках, которая, очевидно, объясняет происхождение множественных намагничивающих плато в разбавленных моделях. Настоящие результаты были сопоставлены с результатами исследования разбавленной АФМ модели Изинга на трехмерной решетке пирохлора в магнитном поле вдоль направления [111], что иногда называют проблемой «кагоми-лед». Мы обсудили сходство и различие кривых намагничивания для состояния «кагоми-лед» и для 2D-решетки кагоми. Обе модели имеют пять намагничивающих плато, но положения ступеней намагничивания различны. Это связано с тем, что условие конкуренции между обменной и зеемановской энергиями в обеих моделях различно.

Эти теоретические результаты подчеркивают разнообразие эффектов взаимовлияния разбавления и магнитного поля во фрустрированных системах. Настоящее исследование треугольной и кагоми-решеток показало, что явление ступенчатого поведения намагниченности общее в разбавленных фрустрированных системах. Необходимы дальнейшие экспериментальные исследования, чтобы продемонстрировать явления в природных и искусственных материалах из спинового льда [23]. Антиферромагнитные спиновые системы на решетке пирохлора вносят богатое разнообразие в физику фрустрированных систем. Планируется исследование эффектов магнитного поля в других направлениях с переходом Кастеляна [24].

Список литературы

- [1] M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, and K. W. Godfrey, “Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. Lett.*, **79**:13, (1997), 2554–2557.
- [2] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. S. Shastry, “Zero-point entropy in ‘spin ice’”, *Nature (London)*, **399**, (1999), 333–335.
- [3] S. T. Bramwell and M. J. P. Gingras, “Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials”, *Science*, **294**, (2001), 1495–1501.
- [4] M. J. Harris, S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth, and J. D. M. Champion, “Liquid-Gas Critical Behavior in a Frustrated Pyrochlore Ferromagnet”, *Phys. Rev. Lett.*, **81**:20, (1998), 4496–4499.
- [5] R. Moessner and S. L. Sondhi, “Theory of the [111] magnetization plateau in spin ice”, *Phys. Rev. B*, **68**:6, (2003), 064411.
- [6] S. V. Isakov, K. S. Raman, R. Moessner, and S. L. Sondhi, “Magnetization curve of spin ice in a [111] magnetic field”, *Phys. Rev. B*, **70**:10, (2004), 104418.
- [7] K. Matsuhira, Z. Hiroi, T. Tayama, S. Takagi, and T. Sakakibara, “A New Macroscopically Degenerate Ground State in the Spin Ice Compound $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ under a Magnetic Field”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, (2002), L559.
- [8] Z. Hiroi, K. Matsuhira, S. Takagi, T. Tayama, T. Sakakibara, “Specific Heat of Kagome Ice in the Pyrochlore Oxide $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **72**:2, (2003), 411–418.
- [9] R. Higashinaka, H. Fukazawa, and Y. Maeno, “Anisotropic release of the residual zero-point entropy in the spin ice compound $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: Kagome ice behavior”, *Phys. Rev. B*, **68**:1, (2003), 014415.
- [10] H. Fukazawa, R. G. Melko, R. Higashinaka, Y. Maeno, and M. J. P. Gingras, “Magnetic anisotropy of the spin-ice compound $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. B*, **65**:1, (2002), 054410.
- [11] L. Pauling, “The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement”, *J. Am. Chem. Soc.*, **57**:12, (1935), 2680–2684.
- [12] X. Ke, R. S. Freitas, B. G. Ueland, G. C. Lau, M. L. Dahlberg, R. J. Cava, R. Moessner, and P. Schiffer, “Nonmonotonic zero-point entropy in diluted spin ice”, *Phys. Rev. Lett.*, **99**:13, (2007), 137203.
- [13] T. Lin, X. Ke, M. Thesberg, P. Schiffer, R. G. Melko, and M. J. P. Gingras, “Nonmonotonic residual entropy in diluted spin ice: A comparison between Monte Carlo simulations of diluted dipolar spin ice models and experimental results”, *Phys. Rev. B*, **90**, (2014), 214433.
- [14] S. Scharffe, O. Breunig, V. Cho, P. Laschitzky, M. Valldor, J. F. Welter, and T. Lorenz, “Suppression of Pauling’s residual entropy in the dilute spin ice $(\text{Dy}_{1-x}\text{Y}_x)_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. B*, **92**:18, (2015), 180405(R).
- [15] Yu. A. Shevchenko, K. V. Nefedev, Y. Okabe, *Phys. Rev. E*, unpublished.
- [16] K. Hukushima and K. Nemoto, “Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **65**, (1996), 1604–1608.
- [17] E. Marinari, “Optimized Monte Carlo methods”, *Advances in Computer Simulation*, ed. J. Kertész and I. Kondor, Springer-Verlag, 1998, 50–81.
- [18] L. W. Lee and A. P. Young, “Single spin- and chiral-glass transition in vector spin glasses in three-dimensions”, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, (2003), 227203.
- [19] Y. Sugita and Y. Okamoto, “Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding”, *Chem. Phys. Lett.*, **314**, (1999), 141–151.
- [20] X. Yao, “Dilute modulation of spin frustration in triangular Ising antiferromagnetic model:

- Wang–Landau simulation”, *Solid State Commun*, **150**:3–4, (2010), 160–163.
- [21] M Žukovič, M. Borovský, and A. Bobák, “Phase diagram of a diluted triangular lattice Ising antiferromagnet in a field”, *Phys. Lett. A*, **374**:41, (2010), 4260–4264.
- [22] A. Peretyatko, K. Nefedev, and Yu. Okabe, “Interplay of dilution and magnetic field in the nearest-neighbor spin-ice model on the pyrochlore lattice”, *Phys. Rev. B*, **95**:14, (2017), 144410.
- [23] Y. Qi, T. Brintlinger, and J. Cumings, “Direct observation of the ice rule in demagnetized artificial kagome spin ice”, *Phys. Rev. B*, **77**:9, (2008), 094418.
- [24] P.W. Kasteleyn, “Dimer Statistics and Phase Transitions”, *J. Math. Phys.*, **4**:2, (1963), 287–293.

Поступила в редакцию
11 мая 2017 г.

A. A. Kuzin, A. A. Peretyatko, K.Š. Soldatov, K. V. Nefedev Diluted spin ice in an external magnetic field. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2017. V. 17. No 1. P. 59–81.

ABSTRACT

The paper presents the research results of the effects arising under the effects of an external magnetic field in dilute plane and bulk spin-ice systems in the Ising spin model with the interaction of the nearest neighbors. We investigated systems of spins on the 2D triangular and kagome lattices, as well as the 3D pyrochlore lattice using the replica-exchange Monte Carlo method. In the absence of dilution, only two plateaus are observed, depending on the magnetization from the external field for all three types of lattices considered. The existence of five plateaus on the magnetization curves of the diluted antiferromagnetic Ising model in an external field [111] on a triangular lattice and a pyrochlore lattice is established. For the spin ice, seven plateaus were observed on the kagome lattice. It is shown that the reason for the occurrence of a plateau is related to the presence of critical fields for the realization of the most energetically favorable local spin configurations in dilute models.

Key words: *Ising model, Metropolis method, replica exchange Monte Carlo, pyrochlore lattice, triangular lattice, kagome lattice.*