ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРА КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОДЕЛИ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА MnF_2 МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

[1]Муртазаев А.К., [2]Магомедов М.А.
[1]Институт физики Дагестанского научного центра РАН, г. Махачкала
[2]Дагестанский государственный университет, г. Махачкала

[1]Муртазаев А.К.
[2]Магомедов М.А.
[1]Институт физики Дагестанского научного центра РАН
[2]Дагестанский государственный университет

В последние годы достигнут значительный прогресс в понимании проблемы фазовых переходов и критических явлений. Центр тяжести теоретических исследований сместился теперь к изучению более реалистичных моделей и учету многочисленных усложняющих факторов, присущих реальным системам, но не учитываемых в моделях первого приближения (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. Эти и некоторые другие причины привели к тому, что фазовые переходы и критические явления интенсивно исследуются методами вычислительной физики: методами Монте-Карло (МК).

Нами, используя высокоэффективный одно-кластерный алгоритм Вульфа метода Монте-Карло [1, 2], выполнены высокоточные исследования статических критических свойств модели реального двухподрешеточного антиферромагнетика MnF_2. Исследование проводилось для систем кубической формы с линейными размерами $L = 10 \div 40$ и числом спинов $N = 2000 \div 128000$. При проведении исследований учитывались все кристаллографические особенности реальных макрообразцов MnF_2.

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 z, причем спины в одной подрешетке направлены противоположно спинам в другой подрешетке (см. Рис.1.). На ЭВМ генерировались марковские цепи длиной до 5×10^8 МК шагов/спин. Для вывода системы в равновесное состояние отсекались неравновесные участки марковской цепи длиной до 10^7 МК шагов/спин.

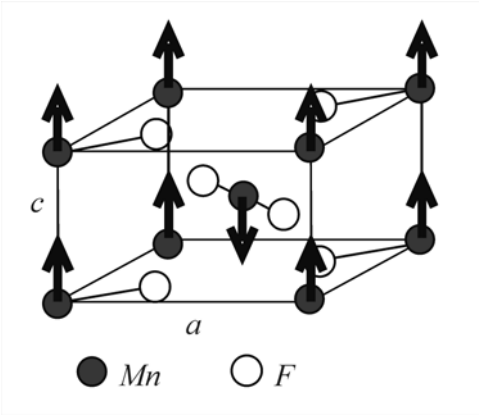

Рис.1. Магнитная структура MnF_2.

С учетом всех особенностей материала гамильтониан модели MnF_2 может быть представлен в следующем виде [3]:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_1\left(\vec{S}_i\vec{S}_j\right) - \frac{1}{2}\sum_{k,l} J_2\left(\vec{S}_k\vec{S}_l\right) - D_A\sum_i\left(S_i^z\right)^2, \qquad \left|\vec{S}_i\right| = 1, \tag{1}$$

где первый член учитывает обменное взаимодействие ионов Mn находящихся в центре и в углах элементарной ячейки ($J_1 < 0$), второй – взаимодействие между ближайшими соседями вдоль оси c ($J_2 > 0$ и $|J_2|/|J_1| = 0.170$), третий – одноосную анизотропию ($D_A / |J_1| = 1.6 \times 10^{-2}$) [3].

Для определения температуры фазового перехода (T_N) нами использовался высокоточный метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [4].

$$U_L = 1 - \left\langle q^4 \right\rangle_L \Big/ 3\left\langle q^2 \right\rangle_L^2 , \qquad (2)$$

где q – параметр порядка системы.

Рассчитанные по соотношению (2) кумулянты для модели MnF_2 даны на рисунке 2. Согласно теории конечно-размерного скейлинга кумулянты для систем различных размеров должны пересекаться в одной точке – в точке фазового перехода. Определенная таким образом критическая температура составила $T_N = 2.1105(5)$.

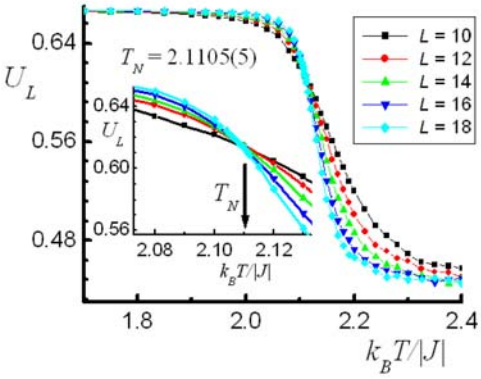

Рис.2. Зависимость кумулянтов U_L от температуры.

Для определения статических критических индексов (таких как критический индекс теплоемкости α, намагниченности β, восприимчивости γ, индекса Фишера η, а также индекса радиуса корреляции ν) модели MnF_2 мы использовали теорию конечно-размерного скейлинга. Таким образом, нами получен следующий набор критических индексов:

$\alpha = 0.119(2)$, $\beta = 0.330(2)$, $\gamma = 1.348(2)$, $\eta = 0.045(5)$, $\nu = 0.645(5)$.

Эти значения находятся в хорошем согласии с данными лабораторных экспериментов, которые дают следующий набор критических индексов [3]:

$\alpha^* = 0.11(2)$, $\beta = 0.335(5)$, $\gamma = 1.27(2)$, $\eta = 0.05(5)$, $\nu = 0.63(2)$.

(* – индекс рассчитан из скейлингового соотношения $\alpha = 2 - d\nu$).

Таким образом, современные высокоэффективные алгоритмы метода Монте-Карло позволяют проводить высокоточные исследования критических свойств сложных реалистичных моделей магнитных материалов и адекватно описывают их критическое поведение.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 04-02-16487), грантом президента РФ по поддержке ведущих научных школ (грант № НШ-2253.2003.2), ФЦП “Интеграция” (№ И0228) и грантом Комиссии РАН по работе с молодежью (№35).

Литература

1. *Муртазаев А.К., Камилов И.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 magnetics with crossovers // Comp. Phys. Com. 2002. V.147. Suppl.1-2. P.447-450.
3. *De Jongh L.J., Miedema A.R.* Experiments on simple magnetic model systems // Adv. Phys. 1974. V.23. №1. P.1-260.
4. *Binder K., Luijten E.* Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models // Physics Reports. 2001. V.344, P.179-253.