

Критические свойства модели антиферромагнетика Cr_2O_3

А. К. Муртазаев

*Институт физики Дагестанского научного центра РАН
Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
E-mail: kamilov@datacom.ru*

Статья поступила в редакцию 8 сентября 1998 г., после переработки 14 декабря 1998 г.

Методом Монте-Карло исследованы критические свойства модели реального антиферромагнетика Cr_2O_3 . Рассчитаны статические критические индексы α , β , γ для систем с периодическими граничными условиями, содержащих от 500 до 4000 спинов. Показано, что значения критических индексов, характер критического поведения и кроссоверные эффекты в значительной мере определяются соотношением между обменом и анизотропией. Результаты сопоставляются с теоретическими данными и с результатами лабораторных исследований Cr_2O_3 . Критические параметры, рассчитанные путем аппроксимации данных традиционными степенными функциями, сравниваются со значениями, полученными на основе представлений теории конечно-размерного скейлинга.

Методом Монте-Карло досліджено критичні властивості моделі реального антиферромагнетика Cr_2O_3 . Розраховано статичні критичні індекси α , β , γ для систем з періодичними граничними умовами, що містять в собі від 500 до 4000 спінів. Показано, що значення критичних індексів, характер критичної поведінки та кросоверні ефекти до значної міри визначаються співвідношенням між обміном і анизотропією. Результати порівнюються з теоретичними даними і з результатами лабораторних досліджень Cr_2O_3 . Критичні параметри, розраховані шляхом апроксимації даних традиційними степеневими функціями, порівнюються із значеннями, одержаними на основі уявлень теорії кінцево-розмірного скейлінга.

PACS: 75.40.Cx; 75.40.Mg; 75.50.Ee

Введение

Исследование фазовых переходов и критических явлений, исходя из трехмерных микроскопических гамильтонианов, все еще остается одной из центральных проблем современной статистической физики [1,2]. При этом в последние годы центр тяжести исследований сместился в сторону изучения более реалистичных моделей, учитывающих особенности, существующие в реальных системах, но не принимаемые во внимание в простейших моделях (классические модели Изинга, Гейзенберга и т. д.). Примерами такого рода особенностей являются эффекты, связанные с наличием различных типов анизотропии, диполь-дипольных и многоспиновых взаимодействий, и ряд других. Их учет становится особенно важным вблизи критических температур. Строгое исследование трехмерных микроскопических гамильтонианов сложных реальных систем методами со-

временной теоретической физики — чрезвычайно сложная задача.

В этой связи возрастает роль и значение методов вычислительной физики, таких как методы Монте-Карло (МК) [3], которые позволяют с достаточно большой точностью и в широком диапазоне различных физических параметров изучать труднодоступные для теоретических подходов системы. До недавнего времени при исследовании методами численного эксперимента различных систем, претерпевающих фазовые переходы, критическая область рассматривалась лишь на качественном уровне. В последние годы методы МК используются и в критической области для расчета значений критических индексов (КИ) и критических амплитуд (КА). При этом достигаемая точность не только не уступает, но зачастую превосходит лучшие результаты, полученные другими методами [4–8]. Естественно, что подобные успехи не могут быть достигнуты только лишь

путем увеличения вычислительных мощностей современных компьютеров, без использования некоторых дополнительных идей и методов. Среди последних необходимо отметить, с одной стороны, разработку мощных кластерных алгоритмов в методе МК [9–11] и гистограммных методов анализа данных [12–14], с другой — использование идей, заложенных в теории конечноразмерного скейлинга (КРС), для расчета критических параметров [15–17].

До сих пор в основном исследовались обычные ферромагнитные системы с взаимодействием между ближайшими соседями с простыми типами решеток [5–7]. Значительно меньше внимания уделялось более сложным и реалистичным антиферромагнитным моделям, а также моделям для конкретных магнитных материалов с учетом их особенностей и специфики.

Другой важный аспект применения методов МК к моделям реальных магнитных материалов заключается в том, что появляется возможность сопоставления результатов численного анализа не только с теоретическими предсказаниями, но и с экспериментальными данными. Это особенно важно, когда результаты лабораторных исследований критических явлений противоречивы и не позволяют однозначно ответить на некоторые важные вопросы.

В настоящей работе рассматриваются критические явления в моделях реального антиферромагнетика Cr_2O_3 . Интерес к нему обусловлен несколькими причинами.

Во-первых, Cr_2O_3 является многоподрешеточным одноосным слабо анизотропным АФ со сложной кристаллографической структурой, в котором существенны взаимодействия каждого иона Cr (в дальнейшем спина) не только с первыми, но и с последующими ближайшими соседями. Критические явления в такого рода системах методами численного эксперимента практически не исследовались.

Во-вторых, АФ Cr_2O_3 имеет удобную для лабораторных экспериментов температуру фазового перехода $T_N = 307$ К и достаточно хорошо изучен. Но данные лабораторных исследований критических свойств Cr_2O_3 не дают возможности составить полную и строгую картину критического поведения Cr_2O_3 [18,19] и определить зависимость критических параметров от тех или иных термодинамических величин. Ответы на подобные вопросы можно получить в результате численного эксперимента, где все величины находятся под контролем.

Модель и метод исследования

Установлено, что Cr_2O_3 является АФ типа легкая ось с температурой Нееля около 307 К со структурой корунда и ромбоэдрической элементарной ячейкой. Четыре магнитных иона Cr располагаются на пространственной диагонали [111], ось легкого намагничивания z совпадает с этим направлением [18,19]. На основе экспериментов по рассеянию нейтронов и теории спиновых волн установлено, что в Cr_2O_3 наиболее существенными являются взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями [20]. С учетом этих особенностей при отсутствии внешнего магнитного поля гамильтониан Cr_2O_3 может быть представлен в следующем виде [21,22]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1(\boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{1}{2} \sum_{k,l} J_2(\boldsymbol{\mu}_k \boldsymbol{\mu}_l) - D \sum_i (\boldsymbol{\mu}_i^z)^2, \quad (1)$$

$$|\boldsymbol{\mu}| = 1,$$

где J_1 — параметр обменного взаимодействия каждого иона Cr с одним ближайшим соседом на расстоянии $r_{ij} = 2,65$ Å и J_2 — с тремя следующими соседями на расстоянии $r_{kl} = 2,89$ Å ($J_1 = 2,2 J_2$, $J_1 < 0$, $J_2 < 0$ [20]). В работе [23] показано, что в Cr_2O_3 , анизотропия обусловлена диполь-дипольными взаимодействиями и магнитной кристаллографической анизотропией, а из расчетов в [24] следует, что второй тип анизотропии почти в два раза превосходит первый. Исходя из этого, релятивистские взаимодействия различного типа аппроксимировались эффективной одноинной анизотропией $D > 0$.

С нашей точки зрения, необходимо рассмотреть следующие значения соотношения между анизотропией D и обменом J_1 :

$D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-4}$, соответствующее реальным образцам Cr_2O_3 , и $D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-2}$, характерное для малых магнитных систем с одноосной анизотропией и размерами в несколько десятков ангстрем [24,25].

Первый случай назовем моделью I, второй — моделью II. Все кристаллографические, обменные и другие данные, использованные для модели I, соответствует реальным образцам Cr_2O_3 . В модели II для константы анизотропии D использовано значение, соответствующее малым магнитным системам (частицам), так как, несмотря на наличие периодических граничных условий (ПГУ), моделируемые методом МК системы имеют конечные линейные размеры ($L \ll \infty$, $L \sim N^{1/3}$), вследствие чего возможно проявление некоторых свойств, характерных для малых систем.

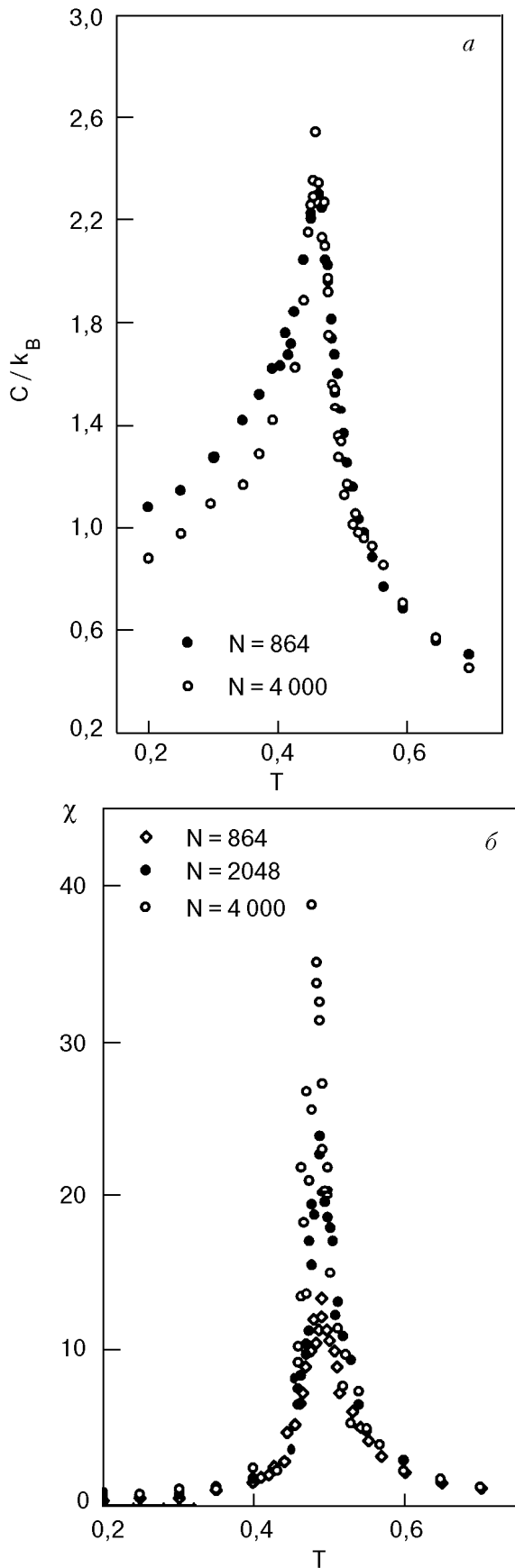


Рис. 1. Зависимости теплоемкости C/k_B (а) и восприимчивости χ (б) (модель II) от нормированной температуры T для систем с различным числом спинов N .

Расчеты проводились методом Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса [3] для систем с ПГУ с числом спинов $N = 500; 864; 1372; 2048; 2916; 4000$. При этом для достижения термодинамического равновесия для каждой системы отсекался участок марковской цепи длиной до $3 \cdot 10^4$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше, чем неравновесный участок. Затем осуществлялось усреднение по равновесному участку длиной $12 \cdot 10^5$ МКшагов/спин. Для контроля за точностью результатов проводились и проверочные эксперименты с увеличением этих значений в два раза. При этом сколько-нибудь заметного повышения точности расчетов не наблюдалось.

Результаты расчетов

При изучении температурных зависимостей теплоемкости C и восприимчивости χ использовались выражения, основанные на флуктуационно-диссипационной теореме [6],

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

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (3)$$

где $K = |J_1|/k_B T$; U — внутренняя энергия; m — подрешеточная намагниченность.

На рис. 1 показаны зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ для систем с разным количеством спинов от температуры T (здесь и далее температура дана в единицах, где $k_B/|J_1| = 1$). Как видно на рис. 1,а, для модели Cr_2O_3 максимальные значения теплоемкости C_{\max} для систем с разным числом спинов в пределах погрешности совпадают по температуре. С увеличением N наблюдается лишь рост абсолютных значений C_{\max} . Аналогичные особенности характерны и для восприимчивости (рис. 1,б). Обычно для такого рода систем даже при наличии ПГУ наблюдаются эффекты, связанные со смещением C_{\max} и χ_{\max} при изменении числа спинов N (или $L \sim N^{1/3}$) в системе. Отсутствие этих особенностей свидетельствует о том, что использованный способ наложения ПГУ достаточно хорошо снимает различные граничные эффекты. Тем не менее температуры, на которые приходится максимумы теплоемкости C_{\max} и восприимчивости χ_{\max} , не совпадают. На рис. 2 представлена температурная зависимость подрешеточной намагниченности m для двух систем с $N = 864$ и 2916 . Наблюдается монотонное уменьшение величины m . Отметим, что эффекты, связанные с конечным числом спинов N , в частности остаточная намагниченность, в высокотемпературной фазе сильно

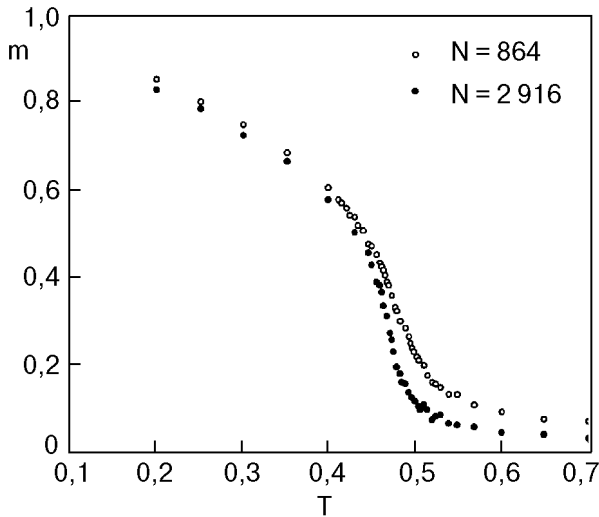


Рис. 2. Зависимость подрешеточной намагниченности m от температуры T (модель II).

уменьшаются с ростом N . Определение исходя из данных, представленных на рис. 1, 2, критической температуры содержит большую погрешность.

В общем случае метод МК также сталкивается с серьезными затруднениями при нахождении истинной температуры фазового перехода T_c ($L = \infty$) в такого рода системах. Это обусловлено еще и тем, что даже при наличии ПГУ эффективная температура перехода T_c часто зависит от L . К тому же, T_c , определенные по максимумам теплоемкости $T_c(C_{\max})$ и восприимчивости $T_c(\chi_{\max})$, как и в нашем случае, практически никогда не совпадают. Разного рода трудности встречаются и при определении T_c другими способами.

Очевидно, эта ситуация изменилась с тех пор, как Биндер предложил использовать для определения T_c метод кумулянтов намагниченности четвертого порядка U_L [27]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (4)$$

где m — намагниченность, приходящаяся на один спин.

Этот метод может быть использован для определения критической температуры систем с различными линейными размерами. Дело в том, что при тщательно выполненных расчетах кумулянты U_L для систем всех размеров должны пересекаться в точке с температурой $T = T_c(L)$, что вытекает из теории КРС [15–17]. Для ферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга с взаимодействием между ближайшими соседями многие аспекты определения T_c этим способом представлены в [5,6].

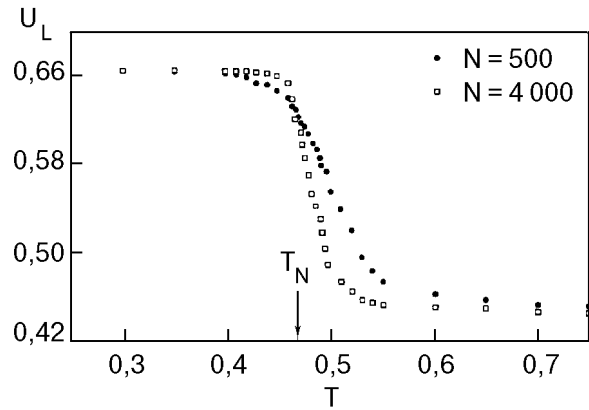


Рис. 3. Зависимость кумулянта U_L от температуры T (модель I).

Для рассматриваемой нами модели зависимость кумулянта Биндера от температуры для двух систем с $N = 500$ и 4000 (модель I) представлена на рис. 3. Аналогичная зависимость наблюдается и для модели II. Температуры перехода при этом для моделей I и II имеют соответственно значения $T_N = 0,466(2)$ и $0,480(2)$, которые нами использовались в дальнейшем в качестве критических. Несколько большая T_N для модели II согласуется с известным фактом о более высоком значении T_c изинговских систем по сравнению с гейзенберговскими. Использованное для модели II значение анизотропии $D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-2}$ усиливает изинговские свойства модели и, как будет видно далее, сказывается на величинах всех критических параметров.

Для аппроксимации критического поведения теплоемкости использовались выражения [19,28]

$$C = \frac{A}{\alpha} |t|^{-\alpha} (1 + D_s |t|^x), \quad (5)$$

$$C = \frac{A}{\alpha} (|t|^{-\alpha} - 1) + D_s |t|^x, \quad (6)$$

где $t = (T - T_N)/T_N$; α, A, D_s — соответственно критический индекс теплоемкости, критическая амплитуда и амплитуда коррекции к скейлингу. Значение x задавалось равным $0,55$, что соответствует модели Гейзенберга [29].

Обработка данных, полученных методом МК, проводилась нелинейным методом наименьших квадратов. В качестве оптимальных α, A и D_s принимались значения, минимизирующие сумму среднеквадратичных отклонений.

Результаты аппроксимации данных, полученных на основе выражений (5) и (6), достаточно хорошо согласуются между собой. Но окончательно предпочтение нами было отдано выражению (6), так как его использование обеспечивало

большую точность наших данных. Рассчитанные значения α , A , A' для моделей I и II представлены в табл. 1 (для расчета A' при $T < T_N$ использовалось предсказание статического скейлинга $\alpha' = \alpha$ [1]). Все значения α для модели I имеют отрицательный знак, характерный для модели Гейзенберга, практически не зависят от числа спинов в системе и хорошо согласуются с теоретическим значением $\alpha = -0,126(28)$ для изотропной модели Гейзенберга с короткодействующими силами [29]. Отношения критических амплитуд A/A' , определенных по указанной схеме, для всех систем находятся в интервале 0,9–1,1. Картина сильно меняется для модели II, для которой значения α положительны, что является характерным для модели Изинга. Теоретическое значение α для модели Изинга, полученное на основе ϵ -разложения, равно 0,108(9) [29]. Очевидно, относительно большое значение одноионной анизотропии, характерное для малых магнитных частиц [25,26] и принятое нами для модели II, делает системы с ПГУ изинговскими. Отметим, что системы со свободными поверхностями при этом же значении анизотропии сохраняли гейзенберговский характер критического поведения [22]. Отношение между критическими амплитудами находится в интервале $0,75 \leq A/A' \leq 0,9$.

Значения критического индекса α для Cr_2O_3 , определенные из данных лабораторных экспериментов, весьма противоречивы и варьируются в пределах от 0,14 [30] до $-0,12$ [19] в зависимости от метода исследования, интервала изменения t , выбора T_N и некоторых других параметров.

Рассматриваемый нами гамильтониан содержит одноионную анизотропию, следовательно, в такой системе при $t \rightarrow 0$ должен наблюдаться кроссовер от гейзенберговского критического поведения к изинговскому [1]. Для моделей I и II теоретические значения температур кроссовера, рассчитанные из наших данных, соответственно

Таблица 1

Эффективные значения критического индекса α и критических амплитуд A и A' в интервале приведенных температур $5 \cdot 10^{-3} \leq t \leq 7,5 \cdot 10^{-1}$

Число спинов N	$D/ J_1 = 2,5 \cdot 10^{-4}$			$D/ J_1 = 2,5 \cdot 10^{-2}$		
	α	A	A'	α	A	A'
500	-0,15(3)	0,61(2)	0,60(2)	0,11(3)	0,53(3)	0,70(3)
864	-0,15	0,56	0,56	0,12	0,43	0,61
1372	-0,16	0,51	0,49	0,10	0,44	0,57
2048	-0,12	0,47	0,46	0,13	0,44	0,52
2916	-0,15	0,53	0,53	0,10	0,38	0,42
4000	-0,14	0,47	0,48	0,15	0,42	0,43

равны $t_{\text{cr}} \approx 0,0013$ и $0,052$. Значения α , полученные для модели I, при $5 \cdot 10^{-3} \leq t \leq 7,5 \cdot 10^{-1}$ не обнаруживают наличия кроссовера. А модель II во всех температурных интервалах имеет изинговский характер.

Для составления более цельной картины критического поведения исследуемых моделей необходимо рассмотреть зависимость подрешеточной намагниченности и восприимчивости от температуры. Обе эти величины являются неудобными для исследования методом МК [22]. На рис. 2 показано, что с ростом температуры намагниченность монотонно уменьшается, но отлична от нуля даже при T значительно выше T_N .

Для аппроксимации критического поведения m использовалось выражение

$$m = B|t|^\beta (1 + a_m |t|^x), \quad (7)$$

где β , B , a_m — критический индекс, критическая амплитуда и амплитуда коррекции к скейлингу соответственно.

В табл. 2 представлены значения β в разных диапазонах температур t . Отметим, что значения β для модели I в одном и том же температурном

Таблица 2

Эффективные значения критического индекса β , $t_{\text{max}} = 7,5 \cdot 10^{-1}$

Число спинов N	$D/ J_1 = 2,5 \cdot 10^{-4}$					$D/ J_1 = 2,5 \cdot 10^{-2}$				
	t_{min}									
	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$
500	0,24(3)	0,25	0,26	0,28	0,28	0,18	0,21	0,23	0,24	0,25
864	0,25	0,26	0,27	0,29	0,29	0,20	0,23	0,24	0,25	0,26
1372	0,27	0,29	0,32	0,35	0,36	0,21	0,24	0,25	0,26	0,27
2048	0,28	0,28	0,32	0,33	0,34	0,21	0,24	0,25	0,26	0,28
2916	0,31	0,34	0,35	0,36	0,37	0,25	0,26	0,27	0,29	0,30
4000	0,33	0,35	0,36	0,38	0,38	0,27	0,27	0,28	0,29	0,31

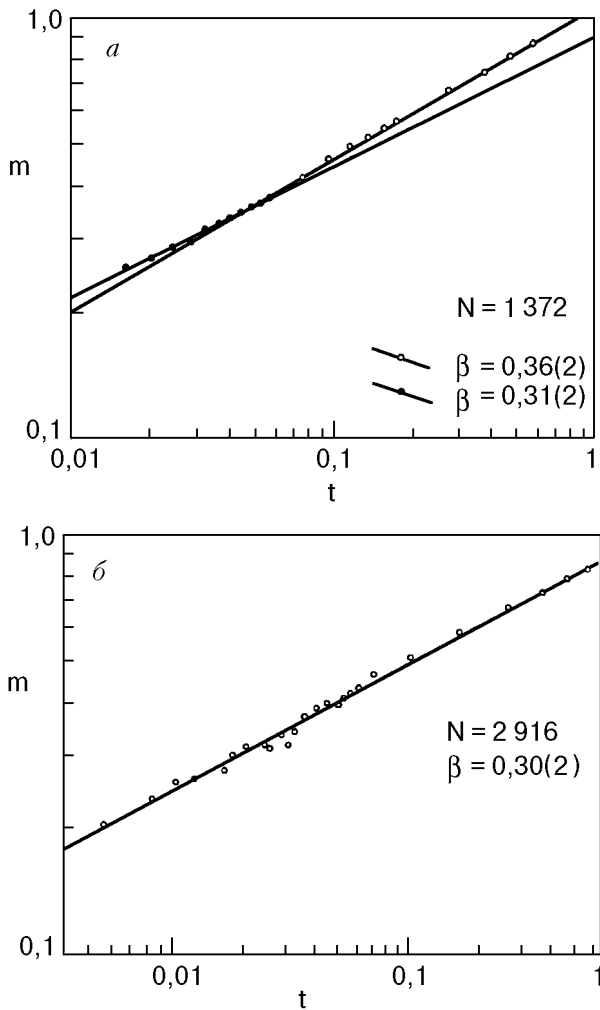


Рис. 4. Двойная логарифмическая зависимость подрешеточной намагниченности m от приведенной температуры t : модель I (а), модель II (б), $t = (T - T_N)/T_N$.

интервале несколько выше, чем для модели II. Индекс β , в отличие от двух других (α и γ), проявляет две особенности:

абсолютная величина β растет с увеличением N ; с увеличением t_{\min} значения β также возрастают.

Обе эти особенности, по-видимому, связаны с эффектами ближнего порядка, о наличии которых свидетельствуют высокотемпературные «хвосты» намагниченности, показанные на рис. 2.

В зависимости подрешеточной намагниченности m от приведенной температуры t , представленной в двойном логарифмическом масштабе для модели I при $t_{\text{cr}} \approx 0,05$ наблюдается характерный для кроссовера излом. На рис. 4,а демонстрируется эта зависимость с двумя значениями $\beta \approx 0,31(2)$ при $t \leq t_{\text{cr}}$ и $\beta \approx 0,36(2)$ при $t > t_{\text{cr}}$ для системы с $N = 1372$. В модели I аналогичная картина наблюдается для всех систем независимо от N . Вероятно, эти данные свидетельствуют о наличии в модели I кроссовера от гейзенберговского критического поведения с $\beta \approx 0,36$ (теоретическое значение β для модели Гейзенберга $\beta \approx 0,367$ [29]) к изинговскому с $\beta \approx 0,31$ (для модели Изинга $\beta = 0,326$ [29]), чего не наблюдалось в поведении теплоемкости.

Характерная зависимость m от t для модели II в системе с $N = 2916$ показана на рис. 4,б. Как видно, в этом случае отсутствуют какие-либо особенности, присущие модели I. Полученные для этой модели значения $\beta \approx 0,30(2)$ весьма близки к теоретически предсказанным для модели Изинга.

Экспериментальное значение β в интервале температур $3 \cdot 10^{-5} \leq t \leq 3 \cdot 10^{-2}$ составляет 0,35 [31] и близко к теоретическому, найденному для модели Гейзенберга, а также к докроссоверной величине, рассчитанной нами для модели I.

Типичные зависимости восприимчивости χ от температуры T представлены на рис. 1,б. Для их аппроксимации использовалась простая степенная функция

$$\chi = \Gamma |t|^{-\gamma}, \tag{8}$$

где γ, Γ — критический индекс и критическая амплитуда восприимчивости. В табл. 3 приведены

Таблица 3

Эффективные значения критических индексов γ и γ' для системы с ПГУ, $t_{\max} = 7,5 \cdot 10^{-1}$, $D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-2}$

Число спинов N	γ				γ'			
	t_{\min}							
	$1 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-2}$
500	0,86	1,05	1,08	1,17	0,92	1,07	1,15	1,29(4)
864	0,87	1,07	1,10	1,17	0,93	1,08	1,20	1,31
1372	0,89	1,09	1,13	1,19	0,94	1,10	1,15	1,32
2048	0,90	1,11	1,15	1,21	0,96	1,12	1,19	1,31
2916	0,89	1,10	1,11	1,18	1,03	1,14	1,21	1,34
4000	0,93	1,12	1,17	1,23	1,03	1,15	1,22	1,33

величины γ и γ' , полученные для модели I на основе выражения (8) независимо друг от друга соответственно из данных при $T > T_N$ и $T < T_N$. Отметим, что γ и γ' так же, как и α , не зависят от числа спинов N в исследуемой системе, но их значения увеличиваются с ростом t_{\min} . По абсолютным величинам γ и γ' трудно судить о характере критического поведения восприимчивости как о гейзенберговском ($\gamma = 1,39$ [29]) либо изинговском ($\gamma = 1,24$ [29]). Аналогичные данные, полученные для модели II, в пределах погрешности совпадают с представленными в табл. 3. Возможно, такое поведение γ и γ' связано с недостаточной разрешающей способностью способа обработки такой сильной флуктуирующей величины, какой является восприимчивость. Как мы увидим в следующем разделе, анализ тех же данных на основе другого подхода дает более ясную картину критического поведения восприимчивости.

Конечноразмерный скейлинг

Основные положения конечноразмерного скейлинга (КРС) сводятся к тому, чтобы учесть влияние конечных ($L \ll \infty$) размеров моделируемых систем, так как именно такими являются системы, исследуемые методами МК. Подобные системы хорошо воспроизводят термодинамические свойства бесконечно больших до тех пор, пока корреляционная длина ξ не превышает линейного размера системы L . Вблизи критической точки $\xi \geq L$ свойства систем в значительной мере зависят от типа периодических граничных условий, и в случае ПГУ флуктуации могут «перекидываться» на противоположные стороны, чего в реальных системах не происходит. Следствием является появление эффектов «округления», например эффектов дальнего порядка выше T_c , сглаживание пиков теплоемкости и восприимчивости, смещение их по температуре и т. д. Идеи, заложенные в теории КРС, позволяют экстраполировать МК-данные, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу ($N = L^3 \rightarrow \infty$) и широко используются [5–11]. В соответствии с этой теорией свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ и при температуре достаточно близкой к критической T_c масштабируется следующим образом [15–17]:

$$F(T, L) = L^{-d} F(tL^{1/\nu}), \quad (9)$$

где $T_c = T_c(L \rightarrow \infty)$; d — размерность пространства; ν — статический критический индекс корреляционной длины бесконечно большой системы ($L = \infty$). Выражение (9) приводит к аналогичным

зависимостям для теплоемкости, намагниченности и восприимчивости, приходящихся на один спин:

$$C(T, L) \sim L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (10)$$

$$m(T, L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (11)$$

$$\chi(T, L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (12)$$

где α, β, γ — статические критические индексы, связанные между собой соотношениями гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta - \gamma$ [1]. Уравнения (10)–(12) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечных систем для больших $tL^{1/\nu}$ ($t \ll 1$ и $L \rightarrow \infty$). Справедливость представлений теории КРС была доказана в целом ряде исследований [5–8].

Из этой теории следует, что в системе размера $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L намагниченность и восприимчивость удовлетворяют следующим выражениям:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (13)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (14)$$

Анализ наших данных, выполненный на основе соотношений (13) и (14), также позволил определить значения β и γ . Для этого строились в двойном логарифмическом масштабе зависимости m и χ от линейных размеров решетки L . Угол наклона прямой определяет значения β/ν и γ/ν . Полученные таким образом величины для модели I равны $\beta/\nu = 0,544$ и $\gamma/\nu = 1,985$. Если учесть, что модель I проявляет явно выраженный гейзенберговский характер и принять, что $\nu = 0,706$ [29], то $\beta = 0,38(2)$ и $\gamma = 1,38(2)$. Отметим, что эти значения β и γ согласуются с теоретическими, рассчитанными для модели Гейзенберга ($\beta = 0,368$, $\gamma = 1,39$ [29]). Для модели II $\beta/\nu = 0,426$ и $\gamma/\nu = 1,791$. Поскольку эта модель проявляет изинговский характер, а исходный гамильтониан — гейзенберговский, определим индексы как при $\nu = 0,706$ (модель Гейзенберга), так и при $\nu = 0,63$ (модель Изинга [29]). Таким образом, $\beta = 0,30(2)$, $\gamma = 1,26(3)$ при $\nu = 0,706$ и $\beta = 0,27(2)$, $\gamma = 1,13(3)$ при $\nu = 0,63$. Отметим, что результаты, полученные для модели II при любом ν , ближе к теоретическим значениям модели Изинга ($\beta = 0,326$, $\gamma = 1,24$ [29]), хотя и не совсем совпадают с ними.

При ярко выраженном пикообразном ходе зависимости теплоемкости обычно для масштабирования C_{\max} используется следующее выражение [6,32]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (15)$$

где a — некоторый коэффициент. Аппроксимация данных, выполненная на основе выражения (15), дает значение критического индекса $\alpha = -0,14(3)$ для модели I и $\alpha = 0,16(3)$ при $\nu = 0,706$ и $\alpha = 0,14(3)$ при $\nu = 0,63$ для модели II. Эти результаты также хорошо согласуются с теоретическими данными, полученными для модели Гейзенберга ($\alpha = -0,126$ [29]) и модели Изинга ($\alpha = 0,108$ [29]), а также с данными анализа результатов МК-расчетов на основе традиционных степенных функций.

Заклучение

Наши результаты, полученные методом МК при исследовании моделей реального антиферромагнетика Cr_2O_3 , свидетельствуют о том, что модель I с анизотропией $D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-4}$ проявляет гейзенберговский характер критического поведения. Критические индексы теплоемкости α , определенные аппроксимацией данных степенными функциями и из соотношений теории КРС, хорошо согласуются как между собой, так и с теоретическими значениями.

Индексы β и γ , найденные традиционным способом из выражений (7) и (8), проявляют специфику, характерную для МК-данных, и по ним трудно судить о характере критического поведения. Результаты, полученные для α , β и γ из обработки тех же данных, в соответствии с теорией КРС однозначно устанавливают принадлежность модели I к гейзенберговскому классу универсальности с критическими индексами $\alpha = -0,14(3)$, $\beta = 0,38(2)$, $\gamma = 1,38(2)$.

Анализ данных, полученных при $D/|J_1| = 2,5 \cdot 10^{-2}$ (модель II) и обработанных на основе обоих подходов, свидетельствует о том, что для модели II характерен изинговский характер критического поведения.

Отметим, что, хотя значения критических индексов α , β , γ , полученных на основе теории КРС, лучше согласуются с теоретическими и экспериментальными результатами, анализ этих же данных путем их аппроксимации степенными функциями позволяет получить обширную дополнительную информацию. По нашему мнению, для составления наиболее полной картины критического поведения такого рода систем необходим анализ результатов МК-моделирования этими двумя способами.

Автор выражает благодарность за поддержку и полезные обсуждения чл.-корр. РАН И. К. Ками-

лову, профессорам Х. К. Алиеву и П. Н. Воронцову-Вельяминову.

1. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
2. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1995).
3. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
4. D. P. Landau, *Physica A* **205**, 41 (1994).
5. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *Phys. Rev.* **B44**, 5081 (1991).
6. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).
7. Kun Chen, M. A. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev.* **B48**, 3249 (1993), I.
8. D. Ledue, D. P. Landau, and J. Tillet, *Phys. Rev.* **B49**, 12523 (1995), II.
9. R. N. Swendsen, and J.-Sh. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
10. V. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
11. V. Wolf, *Nucl. Phys.* **B322**, 759 (1989).
12. A. M. Ferrenberg and R. N. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
13. A. M. Ferrenberg and R. N. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
14. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, *Phys. Rev.* **B43** 5846 (1991).
15. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
16. M. N. Barber, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Academic Press, New York (1983), V. 8.
17. *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation*, N. Privman (ed.) World Scientific, Singapore (1990).
18. R. H. Bruce and D. S. Cannel, *Phys. Rev.* **B15**, 4451 (1977).
19. M. Marinelli, F. Mercury, U. Zammit, R. Pizzoferrato, F. Scudieri, and D. Podariat, *Phys. Rev.* **B49**, 9523 (1994), II.
20. E. J. Samuelsen, M. T. Hutchings, and G. Shirane, *Physica* **48**, 13 (1970).
21. А. К. Муртазаев, И. А. Фаворский, *ФНТ* **19**, 160 (1993).
22. А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, И. К. Камилов, К. Ш. Хизриев, *ФНТ* **24**, 462 (1998).
23. S. Foner, *Phys. Rev.* **30**, 183 (1963).
24. J. O. Artman, J. C. Murphy, and S. Foner, *Phys. Rev.* **138A**, 912 (1965).
25. L. J. Dormann, D. Fiorani, and E. Trone, *Adv. Chem. Phys.* **98**, 283 (1997).
26. P. V. Hendriksen, S. Linderoth, and P.-A. Lindgard, *Phys. Rev.* **B48**, 7259 (1993), II.
27. K. Binder, *Z. Phys.* **B43**, 119 (1981).
28. G. Bednarz, D. J. W. Geldern, and M. A. White, *Phys. Rev.* **B47**, 14247 (1993).
29. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *Phys. Lett.* **46**, L137 (1985).
30. A. Barchellerie and C. H. Frenois, *J. Phys. (Paris)* **35**, 30 (1974).
31. E. Fisher, G. Gorodetsky, and S. Shtrikman, *J. Phys. (Paris) Colloq.* **32**, 1 (1971).
32. Th. T. A. Paauw, A. Compagner, and D. Bedeaux, *Physica* **A79**, 1 (1975).

**Critical properties of the model of
antiferromagnet Cr₂O₃**

A. K. Murtazaev

The critical properties of the model of real antiferromagnet Cr₂O₃ are investigated via Monte Carlo method. The static critical exponents α , β , and γ are calculated for systems with periodic boundary conditions containing from 500 up to 4000 spins. It is

shown that the relation between exchange and anisotropy constants determines largely the values of critical exponents, character of critical behaviour and crossovers effects. The results are compared with calculated and measured data for Cr₂O₃. The critical parameters calculated by approximating the data by traditional exponential functions are compared with those obtained from the finite-size scaling theory.