

## Критические свойства малых магнитных частиц $\text{YFeO}_3$

А.К. Муртазаев<sup>1</sup>, И.К. Камилов<sup>1</sup>, Ж.Г. Ибаев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики Дагестанского научного центра РАН  
ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия  
E-mail: m\_akai@iwt.ru*

<sup>2</sup>*Негосударственное образовательное учреждение «Кавказский светский институт»  
ул. Гамидова, 27, г. Махачкала, 367030, Россия  
E-mail: ibaev77@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 11 января 2006 г.

Предложены модели малых магнитных частиц ортоферрита иттрия. Методами Монте-Карло исследованы статические критические свойства этих моделей. С помощью традиционного аппарата степенных функций вычислены основные статические критические индексы рассмотренных моделей и определены их классы универсальности. Показано, что модели малых магнитных частиц  $\text{YFeO}_3$  в основном описываются изинговским классом универсальности критического поведения. Полученные результаты позволяют объяснить противоречие между экспериментально наблюдаемой и теоретически ожидаемой картиной критического поведения малых магнитных частиц ортоферрита иттрия.

Запропоновано моделі малих магнітних частинок ортоферриту ітрію. Методами Монте-Карло досліджено статичні критичні властивості цих моделей. За допомогою традиційного апарата степеневих функцій обчислено основні статичні критичні індекси розглянутих моделей і визначено їхні класи універсальності. Показано, що моделі малих магнітних частинок  $\text{YFeO}_3$  в основному описуються ізінгівським класом універсальності критичного поведіння. Отримані результати дозволяють пояснити протиріччя між експериментально спостережуваною і теоретично очікуваною картиною критичного поведіння малих магнітних частинок ортоферриту ітрію.

PACS: 64.60.Cn

**Ключевые слова:** ортоферрит, итрий, модель, Монте-Карло, класс универсальности.

### 1. Введение

Количественное описание критических явлений в различных решеточных системах до сих пор остается одной из наиболее трудных задач современной теории конденсированного состояния. Для описания используют разнообразные методы теоретической физики: метод ренормализационной группы и  $\epsilon$ -разложение, высоко- и низкотемпературные разложения, метод аппроксимантов Паде и др. [1–3]. Обычно для описания критического поведения решеточных систем, в которых возможен фазовый переход второго рода, используют модели Изинга, Гейзенберга, а также различные их модификации. На основе этих моделей с помощью указанных

выше методов получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком интервале температур. Интенсивно изучались эти модели и методами Монте-Карло (МК) [4,5]. Исследования выполнены на решетках различного типа и пространственной размерности, а также при варьировании большого количества различных параметров с одновременным получением значительного объема сопутствующей информации. В последние годы методами МК успешно исследуют критическую область с вычислением значений критических индексов (КИ) и критических амплитуд (КА) с достаточно хорошей точностью [6–8].

При этом в основном изучались простые ферромагнитные модели с взаимодействием между ближайшими соседями [4]. Значительно менее исследованы реальные системы с учетом конкретной кристаллографической структуры и при наличии слабых релятивистских взаимодействий различного типа. Обычно при рассмотрении критических явлений методами МК стараются уменьшить степень влияния поверхности, и на систему накладывают различные периодические граничные условия [4].

В настоящей работе рассмотрены системы без периодических граничных условий, так как вопросы, связанные с критическими явлениями в наносистемах и малых магнитных частицах [9,10], в которых спины находятся в иных условиях, чем объемные, представляют самостоятельный интерес [11].

## 2. Модель и методы расчета

В настоящей работе предложены и методом МК исследованы модели малых магнитных частиц слабо ферромагнетика  $YFeO_3$  с орторомбической кристаллической решеткой. Все кристаллографические, обменные и другие величины, использованные в ходе численного эксперимента, соответствуют реальным образцам  $YFeO_3$  и получены из экспериментальных исследований.

Гамильтониан  $YFeO_3$  может быть представлен в следующем виде [12–14]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) - \frac{1}{2}D_{dz} \mathbf{d} \sum_{i,j} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - D_a \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

где первый член учитывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ( $J < 0$ ) каждого из ионов  $Fe^{3+}$  со всеми ближайшими соседями; второй — взаимодействие Дзялошинского—Мория;  $\mathbf{d}$  — единичный вектор, направленный вдоль оси  $Z$ ; третий член описывает одноионную анизотропию [13].

Согласно данным, полученным на основе теории молекулярного поля [14,15], параметры взаимодействия Дзялошинского—Мория  $D_{dz}$  и анизотропии  $D_a$  имеют соответственно значения  $D_{dz}/|J| = 2,0 \cdot 10^{-2}$  и  $D_a/|J| = 7,0 \cdot 10^{-3}$ .

Для выяснения характера и особенностей критического поведения малых магнитных частиц  $YFeO_3$  рассмотрены три модели: модель Y1, которая учитывает обменное взаимодействие каждого иона  $Fe^{3+}$  с ближайшими соседями и одноионную анизотропию; модель Y2 учитывает обменное взаимодействие ионов  $Fe^{3+}$  с ближайшими соседями и взаимодействие Дзялошинского—Мория; модель Y3 учитывает

обменное взаимодействие, одноионную анизотропию и взаимодействие Дзялошинского—Мория.

В данной работе ограничимся рассмотрением взаимодействия Дзялошинского—Мория и одноионной анизотропии, которые в основном влияют на формирование класса универсальности критического поведения в такого рода системах. В рассматриваемых моделях не учитываются диполь-дипольные взаимодействия, которые могут влиять главным образом на магнитные свойства, но их влияние на критические свойства менее существенно.

Для проведения расчетов формировались системы кубической формы с линейными размерами  $L \times L \times L$ ,  $L = 10, 14, 18, 22, 26$ . Эффективное число спинов в системах составляло  $N_{\text{eff}} = 1000-17576$ . При этом на ЭВМ генерировались марковские цепи длиной до  $1,0 \cdot 10^6$  МКшагов/спин, вдоль которых и выполнялось усреднение. Для приведения системы в состояние термодинамического равновесия отсекались неравновесные участки длиной до  $4,0 \cdot 10^4$  МКшагов/спин.

## 3. Полученные результаты и их обсуждение

Рассмотрены системы с открытыми поверхностями, так как вопросы, связанные с критическими явлениями в малых частицах [9], и зависимость критических импульсов и критических амплитуд от наличия определенной доли поверхностных спинов, находящихся в несколько иных условиях, чем объемные, представляют и значительный самостоятельный интерес [11]. Для изучаемых частиц доля поверхностных спинов изменялась от 60% для самой маленькой частицы до 23% для частицы с  $N = 17576$ . Поскольку общее количество поверхностных спинов в частицах достаточно велико, их влияние на различные термодинамические параметры должно быть существенным.

Обычный гамильтониан изотропной модели Гейзенберга тщательно исследован различными методами, и значения критических индексов и амплитуд вычислены с хорошей точностью. Для  $YFeO_3$  имеются и результаты экспериментальных исследований критического поведения намагниченности и восприимчивости. При этом у разных авторов и по данным, полученным при измерении намагниченности и восприимчивости различными методами, критические индексы  $\beta$  и  $\gamma$  имеют значения от 0,33(1) до 0,36(1) для  $\beta$  и от 1,0(2) до 1,25(1) для  $\gamma$  [14]. По этим данным невозможно однозначно определить класс универсальности критического поведения  $YFeO_3$ .

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использованы выражения [7]

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

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

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

Температурные зависимости  $C$  и  $\chi$  имеют хорошо выраженные максимумы в критической области. Известно, что  $T_N$  для малых систем смещаются в сторону более низких температур по сравнению с «макросистемами». В наших экспериментах также наблюдается четко выраженное смещение максимумов  $C$  и  $\chi$  с изменением  $N$  (рис. 1, а, б). На рис. 1, в представлены данные о зависимостях критических температур  $T_c$  и  $T_\chi$  от линейных размеров частицы  $L$ , которые определены по максимумам теплоемкости и восприимчивости для модели Y2. Как видно на рис. 1, в, с увеличением размеров частиц температуры, соответствующие максимумам теплоемкости и восприимчивости, смещаются в сторону более высоких, т.е. температура «фазового перехода» возрастает. Такие же зависимости наблюдаются и для двух других моделей.

Для аппроксимации критического поведения теплоемкости использовано выражение [16]

$$C = \left[ \frac{A}{\alpha} (|t|^{-\alpha} - 1) + D|t|^x \right] + B + Et, \quad (4)$$

где  $t = (T - T_N) / T_N$ ;  $\alpha$ ,  $A$ ,  $D$  — соответственно критический индекс, критическая амплитуда и амплитуда коррекции к скейлингу. Значение  $x$  полагали равным 0,55 [5]. Обработку МК данных проводили с использованием нелинейного метода наименьших квадратов. В качестве оптимальных  $\alpha$ ,  $A$ ,  $D$  принимали значения, минимизирующие среднеквадратичное отклонение, а для  $T_N$  брали значения, соответствующие максимумам теплоемкости. Полученные данные для  $\alpha$  представлены в табл. 1. Все значения  $\alpha$  для Y1 при  $T < T_N$  имеют отрицательный знак, характерный для гейзенберговского критического поведения, и по абсолютной величине близки к теоретически вычисленному значению  $\alpha = -0,126(28)$ , полученному для изотропной модели Гейзенберга с короткодействующими силами.

Следует отметить, что, поскольку в гамильтониане (1) для Y1 присутствует член, описывающий одноионную анизотропию, в критическом поведении этой модели должен наблюдаться кроссовер от гейзенберговского к изинговскому [14]. По нашим расчетам кроссовер может наблюдаться при температуре  $t_{cr} = 3,38 \cdot 10^{-2}$ , но значения  $\alpha$ , полученные в диапазоне температур  $8 \cdot 10^{-3} \leq t \leq 9 \cdot 10^{-1}$ , не указывают на наличие кроссовера. Возможно, это связано с тем, что поверхностные спины частиц в модели Y1

слабо закреплены и даже при температурах значительно ниже  $T_N$  свободно переориентируются [17]. Такое их поведение расширяет область с гейзенберговским критическим поведением и может приводить к смещению температуры кроссовера к точке Нееля.

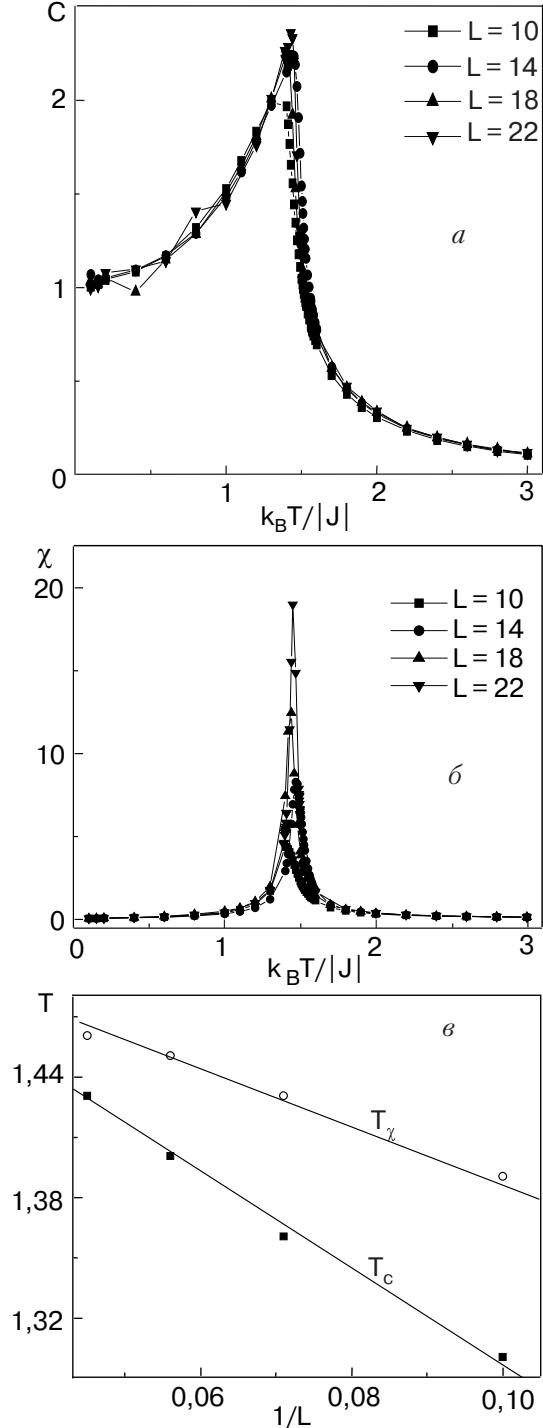


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости (а) и восприимчивости (б), а также зависимость критической температуры от линейных размеров частицы (в) для модели Y2.

Таблица 1. Критические индексы  $\alpha$  для частиц с разным числом спинов  $N$  при  $T < T_N$  и  $0,008 \leq t \leq 0,93$

Модель	$N$	$\alpha$
Y1	10	-0,20(2)
	14	-0,18
	18	-0,12
	22	-0,13
	26	-0,14
Y2	10	0,09(2)
	14	0,03
	18	0,09
	22	0,03
	26	0,03
Y3	10	0,08(2)
	14	0,09
	18	0,13
	22	0,15
	26	0,18

Для моделей Y2 и Y3 на всем исследованном интервале температур значения  $\alpha$  имеют положительный знак, характерный для модели Изинга. Такое поведение можно объяснить тем, что взаимодействие Дзялошинского – Мория в некотором интервале температур приводит к скосу магнитных моментов подрешеток и появлению слабоферромагнитного момента, направленного вдоль оси  $Z$ . Но поскольку обменное взаимодействие упорядочивает в плоскости, перпендикулярной оси легкого намагничивания, для модели Y2 можно ожидать поведение, соответствующее XY-модели или модели Изинга. Полученные значения  $\alpha$  при  $T < T_N$  по абсолютной величине достаточно близки к значениям, соответствующим XY-модели, а по знаку соответствуют изинговскому критическому поведению. Для модели Y3 индекс  $\alpha$  проявляет чисто изинговский характер критического поведения.

Для более подробного выяснения закономерностей критического поведения частиц следует изучить особенности поведения подрешеточной намагниченности и восприимчивости вблизи  $T_N$ .

Сразу отметим, что эти величины неудобны для исследования методами Монте-Карло, так как вблизи  $T_N$  намагниченность  $m$  имеет высокотемпературные «хвосты», а  $\chi$  – сильно флуктуирующая величина.

Температурные зависимости подрешеточной намагниченности показаны на рис. 2. Для аппроксимации критического поведения  $m$  использовано выражение

$$m = B|t|^\beta (1 + a_m |t|^x), \quad (5)$$

где  $\beta$  – критический индекс,  $B$  и  $a_m$  – критическая амплитуда и коррекция к скейлингу. Полученные значения  $\beta$  представлены в табл. 2.

Отметим, что  $\beta$  в отличие от  $\alpha$  и  $\gamma$  проявляет некоторую зависимость от числа спинов в частице: абсолютная величина  $\beta$  растет с увеличением  $N$ . Для всех трех рассмотренных моделей значения индекса  $\beta$  для каждой частицы практически не отличаются. По-видимому, эти особенности связаны с эффектами ближнего порядка, о которых свидетельствуют высокотемпературные «хвосты» намагниченности на рис. 2,а.

На зависимостях  $m$  от  $t$ , полученных для моделей Y1 и Y2, наблюдались характерные для кроссовера изломы при температурах  $3,8 \cdot 10^{-2}$  и  $4,0 \cdot 10^{-2}$  соответственно. На рис. 2,б показана такая зависимость, для частицы с  $N = 2744$  (модель Y2). Отметим, что эта зависимость характеризуется значением  $\beta = 0,36$  до температур  $t = 4,0 \cdot 10^{-2}$ ; при  $t \leq 4,0 \cdot 10^{-2}$  наблюдается зависимость с  $\beta = 0,32$ . Таким образом, эти данные свидетельствуют о наличии кроссоверов от

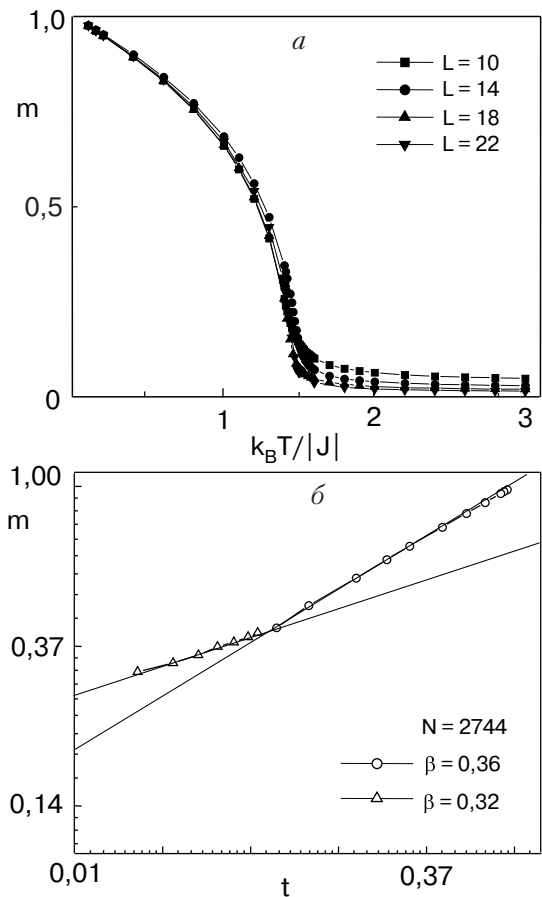


Рис. 2. Температурные зависимости подрешеточной намагниченности (а); двойная логарифмическая зависимость подрешеточной намагниченности от температуры для модели Y2 (б).

Таблица 2. Эффективные значения критического индекса  $\beta$  при  $0,008 \leq t \leq 0,93$

Модель	N	$\beta$	
		$a_m = 0$	$a_m \neq 0$
Y1	10	0,31(2)	0,25(2)
	14	0,23	0,24
	18	0,32	0,32
	22	0,32	0,35
	26	0,32	0,35
Y2	10	0,27(2)	0,22(2)
	14	0,32	0,26
	18	0,33	0,32
	22	0,33	0,27
	26	0,34	0,30
Y3	10	0,26(2)	0,24(2)
	14	0,28	0,27
	18	0,33	0,28
	22	0,34	0,36
	26	0,34	0,38

гейзенберговского критического поведения с  $\beta = 0,36$  к изинговскому с  $\beta = 0,32$  как для модели Y1, так и для Y2. Для модели Y3 такой излом не наблюдается и на всей температурной области  $\beta = 0,32$ , характерное для изинговского критического поведения.

Для расчета критического индекса восприимчивости  $\gamma$  использована простая степенная зависимость:

$$\chi = \Gamma |t|^{-\gamma}, \quad (6)$$

где  $\gamma$  и  $\Gamma$  — критический индекс и амплитуда восприимчивости. Значения критических температур для обработки данных по восприимчивости определяли по максимумам зависимости  $\chi$  от температуры. В табл. 3 представлены величины  $\gamma$ , полученные с использованием выражения (6). По абсолютным значениям  $\gamma$  нельзя сделать вывод о характере критического поведения восприимчивости как об изинговском ( $\gamma = 1,24$  [18]), гейзенберговском ( $\gamma = 1,36$  [18]) или XY ( $\gamma = 1,34$  [18]). В заключение отметим, что при обработке всех данных использован единый методический подход и обработка данных проведена нелинейным методом наименьших квадратов.

### Заключение

Данные по теплоемкости и намагниченности свидетельствуют о наличии кроссовера в характере критического поведения от гейзенберговской моде-

Таблица 3. Эффективные значения критического индекса  $\gamma$  при  $T < T_N$  и  $0,008 \leq t \leq 0,93$

Модель	N	$\gamma$
Y1	10	1,06(3)
	14	1,18
	18	0,98
	22	0,99
	26	0,99
Y2	10	1,00(3)
	14	1,29
	18	1,12
	22	1,20
	26	1,32
Y3	10	1,17(3)
	14	1,22
	18	1,36
	22	1,44
	26	1,42

ли, скорее всего, к изинговскому. Если данные по теплоемкости обнаруживают лишь явно выраженные признаки такого перехода, то значения критического индекса намагниченности  $\beta$  четко принимают значения, характерные для модели Гейзенберга ( $\beta = 0,36$ ), с последующей сменой значения индекса ( $\beta = 0,32$ ) в другом интервале приведенных температур. Многие наблюдаемые особенности критического поведения рассмотренных моделей связаны, в основном, с наличием большой доли слабо закрепленных поверхностных спинов, а характер поведения  $m$  и  $\chi$ , кроме того, определяется присущими методу Монте-Карло особенностями при такого рода исследованиях.

1. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
2. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
3. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Мир, Москва (1982).
4. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
5. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло*, Наука, Москва (1995).
6. P. Peczak and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 1048 (1991).
7. P. Peczak and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).
8. P. Peczak and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B47**, 14260 (1993).
9. Ю.И. Петров, *Физика малых частиц*, Наука, Москва (1982).

10. С.А. Непийко, *Физические свойства малых металлических частиц*, Наукова Думка, Киев (1985).
11. К. Binder and P.C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **B9**, 2194 (1974).
12. M. Eibschutz, S. Shtrikman, and D. Treves, *Phys. Rev.* **152**, 562 (1967).
13. И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **32**, 1547 (1957).
14. И.К. Камиллов, Х.К. Алиев, *Статистические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах*, Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).
15. К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).
16. G. Bednarz, D.J.W. Geldart, and M.A. White, *Phys. Rev.* **B47**, 14247 (1993).
17. А.К. Муртазаев, И.А. Фаворский, *ФНТ* **19**, 160 (1993).
18. J.C. Le Guilio and J. Zinn-Jastin, *J. Phys. Lett.* **45**, L137 (1985).

### Critical properties of small magnetic particles of $\text{YFeO}_3$

A.K. Murtazaev, I.K. Kamilov, and Zh.G. Ibayev

The models of small magnetic particles of  $\text{YFeO}_3$  are proposed. The critical static properties of these models are investigated by the Monte-Carlo methods. Using the traditional degree function technique the main static critical exponents indices of the models used are calculated and their universality classes are determined. It is shown, that models of small magnetic  $\text{YFeO}_3$  particles are mainly described by the Ising class of universality of the critical behavior. The results obtained permit one to explain the contradiction between the experimental behavior of small magnetic  $\text{YFeO}_3$  particles and theoretical expectations.

**Keywords:** orthoferrite, yttrium, model, Monte-Carlo, universality classes.