

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕАЛЬНЫХ МАГНЕТИКОВ МЕТОДАМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ

А.К. МУРТАЗАЕВ, М.А. МАГОМЕДОВ

Институт физики

Дагестанского научного центра РАН

367003, Россия, Дагестан, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

Высокоэффективным однокластерным алгоритмом метода Монте-Карло исследованы статические критические свойства модели антиферромагнетика MnF_2 . Выполнена модификация однокластерного алгоритма для исследования сложных моделей магнетиков, в которых наряду с обменным взаимодействием учитывается и одноосная анизотропия. Рассчитаны все основные статические критические индексы системы: критический индекс теплоемкости α , намагниченности β , восприимчивости γ , индекс Фишера η , а также индекс радиуса корреляции ν .

The highly efficient single-cluster algorithm of the Monte Carlo method is used to investigate the static critical properties of a MnF_2 antiferromagnet model. The single-cluster algorithm is modified to investigate complex magnet models in which the uniaxial anisotropy is taken into account together with the exchange interaction. All main critical static parameters of the system are calculated, including the critical exponents of heat capacity α , magnetization β , and susceptibility γ , the Fisher index η , and the correlation length ν .

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию термодинамических, а также статических и динамических критических свойств магнитных материалов методами вычислительной физики. Большой интерес к компьютерному моделированию различных физических явлений связан как с быстрым ростом производительности современных вычислительных машин, так и с разработкой новейших высокоэффективных алгоритмов и методов исследований, позволяющих значительно увеличить точность вычислений при сокращении общих вычислительных затрат. Среди разработанных в последние годы алгоритмов особо следует отметить кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, которые позволяют проводить высокоточные исследования спиновых систем в области фазовых переходов. Численные данные, полученные на основе этих алгоритмов, не только не уступают по точности другим теоретическим методам, но зачастую и превосходят их [1].

Тем не менее, следует отметить, что к настоящему времени исследования фазовых переходов и критических явлений методом Монте-Карло проведены в основном на упрощенных классических модельных системах, таких как модель Изинга, Гейзенберга, XY-модель, в которых для облегчения решения задач не учитывались многие усложняющие факторы, присущие реальным материалам, такие как одноосная анизотропия, диполь-дипольные взаимодействия и т.д. [2]. В то же время большое количество экспериментальных работ, проведенных на материалах такого рода, показывают, что эти силы могут оказать значительное влияние на характер критического поведения. Примерами таких материалов являются: EuO , EuS , $RbMnF_3$, FeF_2 и MnF_2 [3, 4]. Технологические особенности этих соединений делают их привлекательными для применения в различных современных электронных устройствах, к примеру, в качестве материалов для создания средств хранения информации, а также при разработке и создании различных оптических материалов, применяемых в современных лазерах высокой мощности.

Все эти соединения имеют величину спина $S \geq 2$ и могут быть хорошо описаны классической моделью Гейзенберга с обменным взаимодействием между ближайшими соседями (в некоторых случаях и со вторыми бли-

жайшими соседями), причем обменное взаимодействие в некоторых материалах носит конкурирующий характер [3]. Величина анизотропии в EuO , EuS и $RbMnF_3$ значительна, в то время как в FeF_2 и MnF_2 принимает достаточно большие значения, и в этих системах может наблюдаться смена гейзенберговского критического поведения на изинговское. Выявление степени влияния анизотропии в этих материалах на термодинамические характеристики системы, а также на характер критического поведения представляет определенный интерес.

Нами, используя высокоэффективный однокластерный алгоритм Вульфа метода Монте-Карло [4, 5], выполнены высокоточные исследования статических критических свойств модели реального двухподрешеточного антиферромагнетика MnF_2 . При этом для учета одноосной анизотропии было проведено обобщение кластерного алгоритма, который использовался в сочетании со стандартным алгоритмом Метрополиса. Исследование проводилось для систем кубической формы с линейными размерами $L = 10 \div 40$ и числом спинов $N = 2000 \div 128000$.

При проведении исследований модели MnF_2 нами учитывались следующие особенности этого материала [3,4]:

1. MnF_2 имеет объемцентрированную тетрагональную структуру, которая изображена на рисунке 1. ($a = 4.87 \text{ \AA}$; $c = 3.31 \text{ \AA}$).
2. Основными обменными взаимодействиями в этом материале является слабое ферромагнитное взаимодействие вдоль направления $[001]$ ($J_2 = 0.3 \pm 0.1 \text{ K}$) и антиферромагнитное взаимодействие вдоль направления $[111]$ ($J_1 = -1.76 \text{ K}$). Обменное взаимодействие вдоль направлений $[100]$ и $[010]$ близко к нулю. Таким образом, ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями (вдоль оси c) оказывается намного меньше, чем антиферромагнитное взаимодействие центрального спина со спинами в углах решетки.
3. Существенную роль в MnF_2 может играть сильная одноосная анизотропия типа "легкая ось".

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 спином в другой подрешетке. 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.

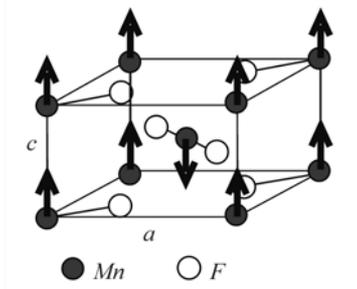


Рис.1.

С учетом всех особенностей реального материала гамильтониан модели MnF₂ может быть представлен в следующем виде:

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

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].

При вычислении термодинамических характеристик системы, таких как параметр порядка q , теплоемкость C , восприимчивость χ использовались следующие флуктуационные соотношения:

$$q = \langle \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2 \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \in A} \mathbf{S}_i - \sum_{i \in B} \mathbf{S}_i \right\rangle, \quad (2)$$

$$C = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (3)$$

$$\chi = (NK) \left(\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2 \right), \quad (4)$$

где $K = |J_1|/k_B T$, \mathbf{m}_1 , \mathbf{m}_2 – магнитные моменты подрешеток.

Рассчитанные таким образом значения параметра порядка q и теплоемкости C приведены на рисунках 2 и 3. Значения температуры приведены в относительных единицах (в единицах обменного интеграла $|J_1|$). Как видно из рисунка 2, параметр порядка q в низкотемпературной области практически не зависит от размеров системы, в то время как при высоких температурах для систем малых размеров наблюдаются характерные для Монте-Карло результатов высокотемпературные “хвосты”, которые, однако, с ростом размеров системы заметно

уменьшаются. Отметим также, что здесь и далее погрешность данных не превышают размеры использованных на рисунках символов.

При определении критических индексов системы на основе теории конечно-размерного скейлинга большое значение имеет точность определения критической температуры. Нами для определения температуры фазового перехода использовался высокоточный метод кумулянтов Биндера [6]:

$$U_L = 1 - \langle q^4 \rangle_L / 3 \langle q^2 \rangle_L^2, \quad (5)$$

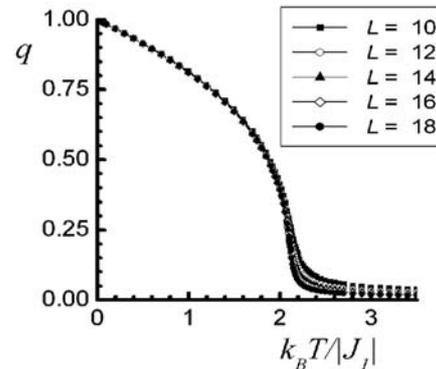


Рис.2.

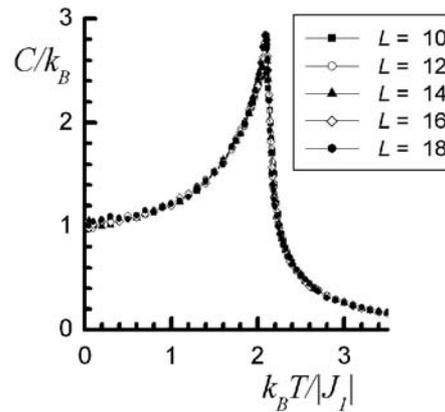


Рис.3.

Согласно теории конечно-размерного скейлинга кумулянты U_L для систем с различными линейными размерами рассчитанные по формуле (5) должны пересекаться в точке фазового перехода. Вычисленные таким образом кумулянты для систем с различными линейными размерами приведены на рисунке 4. Вставка на этом рисунке демонстрирует насколько точно можно определить критическую температуру. Как видно из рисунка, рассчитанная по кумулянтам критическая температура для модели MnF₂ составила $T_N = 2.1085(5)$.

Для определения статических критических индексов (таких как критический индекс теплоемкости α , намагнитичности β , восприимчивости γ , индекса Фишера η , а также индекса радиуса корреляции ν) модели MnF₂ мы использовали следующие выражения [1, 2, 6-8]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{-\alpha/\nu}, \quad (6)$$

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (7)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (8)$$

$$\ln(\chi/L^2) = g - \eta \ln(L), \quad (9)$$

$$V \propto aL^{1/\nu} (1 + bL^{-\omega}), \quad (10)$$

где a , b , g и ω – некоторые постоянные, а параметр V характеризует наклон кумулянтов Биндера в точке фазового перехода и определяется по следующему флуктуационному соотношению [6-8]:

$$V = \frac{1}{3\langle q^2 \rangle^2} \left[\langle q^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle q^4 \rangle \langle q^2 E \rangle}{\langle q^2 \rangle} + \langle q^4 E \rangle \right] \quad (11)$$

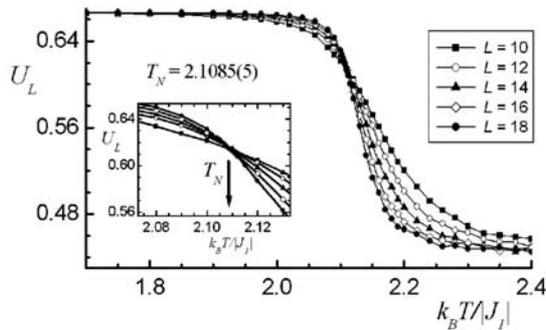


Рис.4.

Таким образом, для модели MnF_2 нами получен следующий набор критических индексов:

$$\alpha = 0.119(2), \quad \beta = 0.330(2),$$

$$\gamma = 1.284(4), \quad \eta = 0.045(5), \quad \nu = 0.645(5).$$

Эти значения находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [3]:

$$\alpha = 0.11(2), \quad \beta = 0.335(5),$$

$$\gamma = 1.27(2), \quad \eta = 0.05(5), \quad \nu = 0.63(2).$$

Как видно из приведенных данных, критические индексы, рассчитанные методом Монте-Карло, близки по значениям с индексами, полученными на основе лабораторных исследований макрообразцов MnF_2 . Это еще раз подтверждает, что предложенная нами модель адекватно описывает свойства реальных образцов материала, а также высокую точность и эффективность использованного метода.

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

Работа выполнена при поддержке гранта президента РФ по поддержке ведущих научных школ (грант № НШ-2253.2003.2) и гранта Фонда содействия отечественной науке.

- | | |
|---|--|
| [1]. И.К.Камилов, А.К.Муртазаев, Х.К. Алиев // УФН.- 1999.- Т.169.- №7.- С. 773-795. | [5]. U.Wolff // Phys. Rev. Lett.- 1989.- V.62.- No.4.- P. 361-364. |
| [2]. И.К.Камилов, А.К.Муртазаев, М.А.Магомедов // ЖЭТФ.- 2001.- Т.120.- №6.- С. 1535-1543. | [6]. K.Binder, E.Luijten // Physics Reports.- 2001.- V.344.- P.179-253. |
| [3]. L.J.De Jongh, A.R. Miedema // Adv. Phys.- 1974.- V.23.- No.1.- P. 1-260. | [7]. A.M.Ferrenberg, R.N. Swendsen // Phys. Rev. Lett.- 1988.- V.61.- No.23.- P. 2635-2638. |
| [4]. М.А. Магомедов А.К. Муртазаев // Известия Вузов. Физика. – 2005. - Т.48, № 2. - С.53-58. | [8]. K.Chen, A.M.Ferrenberg, D.P. Landau // Phys. Rev. B.- 1993. - V.48, No.5.- P.3249-3256. |

Received: 31.01.2007