

КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОДЕЛЕЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА Cr_2O_3

А. К. Муртазаев, И. К. Камиллов, Х. К. Алиев, В. А. Мутайламов*

*Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Мазачкала, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 1999 г.

Методом Монте-Карло исследована критическая динамика моделей реального антиферромагнетика Cr_2O_3 . С помощью аппарата автокорреляционных функций определены времена релаксаций систем, содержащих $N = 256, 500, 864, 2048, 2916$ спинов. На их основе рассчитаны значения динамического критического индекса z .

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

Исследование динамических критических свойств спиновых систем одна из актуальных задач статистической физики. Если в последние годы в исследованиях и понимании статических критических явлений достигнут значительный прогресс, то изучение критической динамики традиционными методами сталкивается со значительными трудностями [1–4]. Это привело к тому, что в настоящее время критическая динамика интенсивно исследуется методами вычислительной физики, в частности методами Монте-Карло [5–10]. В последние годы методом Монте-Карло выполнены тщательные исследования критической динамики модели Изинга [5] и классической модели Гейзенберга [6] на простой кубической решетке с расчетом динамического критического индекса z . При этом как для модели Изинга, так и для модели Гейзенберга полученные значения динамического критического индекса z близки к двойке. Для модели Изинга это значение согласуется с теоретически предсказанными [1], но этого нельзя сказать о модели Гейзенберга, так как для изотропных ферромагнетиков (J -модель [1]) теория предсказывает значение $z = (d + 2 - \eta)/2 \approx 2.5$ (d — размерность пространства, η — индекс Фишера).

В этом плане значительный интерес представляют исследования критической динамики антиферромагнетиков и степень влияния на нее слабых ре-

лятивистских взаимодействий (анизотропии), возмущающих исходное поведение.

В данной работе нами впервые исследована критическая динамика моделей реального гейзенберговского антиферромагнетика Cr_2O_3 со сложной ромбоэдрической структурой. Гамильтониан Cr_2O_3 может быть представлен в следующем виде [11–13]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1(\mu_i \mu_j) - \frac{1}{2} \sum_{k,l} J_2(\mu_k \mu_l) - D_0 \sum_i (\mu_i^z)^2, \quad |\mu_i| = 1, \quad (1)$$

где, согласно экспериментальным данным [11], J_1 и J_2 — параметры взаимодействия каждого спина соответственно с одним ближайшим соседом и с тремя следующими ($J_2 = 0.45J_1$, $J_1 < 0$, $J_2 < 0$). Различные релятивистские взаимодействия задавались эффективной одноионной анизотропией $D_0 > 0$.

С нашей точки зрения, необходимо рассмотреть следующие соотношения между анизотропией D_0 и обменом J_1 :

$$\text{I. } D_0/|J_1| = 2.5 \cdot 10^{-4},$$

соответствующее реальным образцам Cr_2O_3 ;

$$\text{II. } D_0/|J_1| = 2.5 \cdot 10^{-2},$$

характерное для малых магнитных систем с одноосной анизотропией и размерами в несколько десятков ангстрем [14].

*E-mail: kamilov@datacom.ru

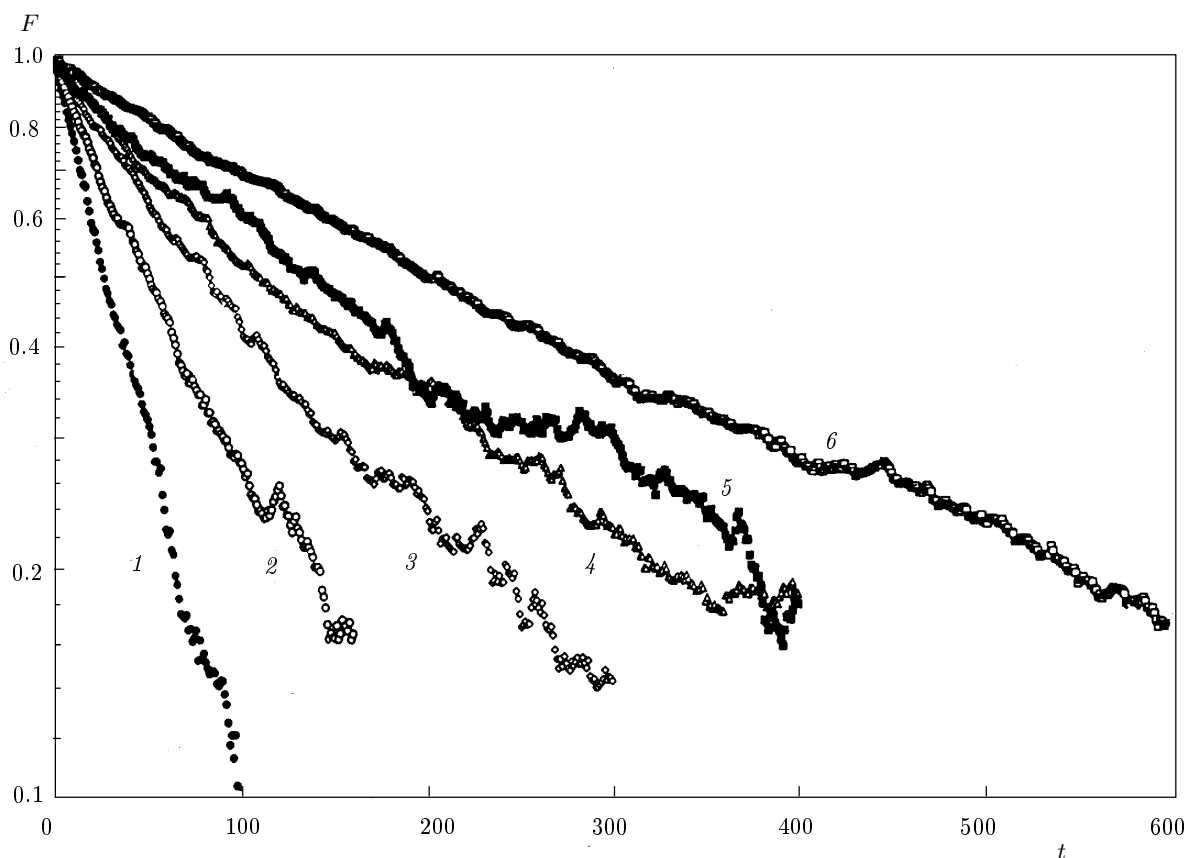


Рис. 1. Временные зависимости автокорреляционных функций F для систем с разным числом спинов N (модель II): 1 — $N = 256$; 2 — $N = 500$; 3 — $N = 864$; 4 — $N = 1372$; 5 — $N = 2048$; 6 — $N = 2916$. Время t измеряется в шагах Монте-Карло и нормируется на спин

Первый случай назовем моделью I, второй — моделью II. Все кристаллографические, обменные и другие данные, используемые для модели I, соответствуют реальным образцам Cr_2O_3 . В модели II для константы анизотропии D_0 использовано значение, характерное для малых магнитных систем (частиц), так как, несмотря на наличие периодических граничных условий, моделируемые методом Монте-Карло системы имеют конечные линейные размеры ($L \ll \infty$, $L \propto N^{1/3}$), вследствие чего возможно проявление некоторых свойств, характерных для малых систем.

Расчеты проводились методом Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса, для чего формировались системы с периодическими граничными условиями, содержащие $N = 256, 500, 864, 2048, 2916$ спинов, расположенных и взаимодействующих в строгом соответствии с кристаллографическими и обменными характеристиками реальных кристаллов Cr_2O_3 .

Согласно динамическому конечно-размерному скейлингу [6, 15], в критической области релак-

сационное время τ масштабируется следующим образом:

$$\tau(\xi, L, t) = L^z f(\xi/L, t/L^z), \quad (2)$$

где ξ — корреляционная длина, а $f(x, g)$ — скейлинговая функция. В критической точке характерная длина корреляций определяется размерами L системы, следовательно, релаксационное время определяется как

$$\tau \propto L^z \quad (3)$$

для асимптотически больших L . Для того чтобы определить z , необходимо найти времена релаксаций системы с различными L . Для этого нами использовался аппарат автокорреляционных функций. Для параметра порядка вектора антиферромагнетизма рассчитывались автокорреляционные функции

$$F(t) = \frac{\langle \mathbf{M}(0)\mathbf{M}(t) \rangle - \langle \mathbf{M}(0) \rangle \langle \mathbf{M}(0) \rangle}{\langle \mathbf{M}(0)\mathbf{M}(0) \rangle - \langle \mathbf{M}(0) \rangle \langle \mathbf{M}(0) \rangle}, \quad (4)$$

где $\mathbf{M}(t)$ — значение параметра порядка в момент времени t . Автокорреляторы для каждой си-

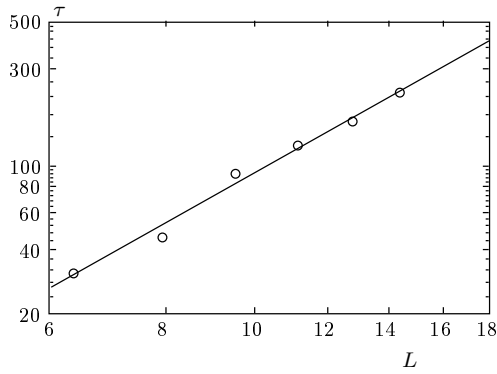


Рис. 2. Зависимость времени релаксации τ [шаг Монте-Карло/спин] от линейных размеров системы L (модель I, $z = 2.54 \pm 0.08$)

стемы прослеживались до тех пор, пока значение $F(t)$ не уменьшалось до 0.1. Полученные значения $F(t)$ аппроксимировались экспоненциальной функцией $F(t) = A \exp(-t/\tau)$, из которой нелинейным методом наименьших квадратов определялись времена релаксации τ .

После достижения равновесного состояния, для того чтобы выполнить усреднения в выражении (4), генерировалась последовательность конфигураций, где одна конфигурация отстояла от другой на время больше τ для каждой системы. Таким образом достигалась независимость последовательных конфигураций. Для всех систем выполнялось по $n = 30000$ усреднений при необходимом минимуме в 22000. После вывода систем в равновесие отсекался еще дополнительный участок марковской цепи длиной в 5τ . Выполнялся и ряд проверочных экспериментов с увеличением всех контрольных цифр в два раза. При этом существенного улучшения результатов не наблюдалось. Для определения критических температур изучаемых систем использовался метод кумулянтов Биндера [16].

На рис. 1 представлена характерная зависимость автокорреляционных функций $F(t)$ для систем с разным числом спинов для модели II. Аналогичные зависимости получались и для модели I. С использованием τ , определенных по указанной выше схеме, строились двойные логарифмические зависимости времен релаксаций τ от линейных размеров L . Рисунок 2 иллюстрирует такую зависимость для модели I. На этом рисунке угол наклона прямой определяет значение индекса z . Полученные таким образом значения динамического критического индекса z составляют $z = 2.54 \pm 0.08$ для модели I и $z = 2.33 \pm 0.08$ для модели II. Отметим, что значение $z = 2.54 \pm 0.08$ расходится с теоретическими

оценками для изотропных ($z = d/2$, G -модель [1]) и анизотропных ($z \approx 2.0$ [4]) антиферромагнетиков, но хорошо согласуется с предсказанным для изотропных ферромагнетиков ($z \approx 2.5$, J -модель [1]). Аналогично, величина $z = 2.33 \pm 0.08$, полученная для модели II, также значительно отличается от теоретических оценок для антиферромагнетиков и принимает промежуточное положение между значениями, предсказанными для изотропных ферромагнетиков ($z \approx 2.5$ [1]) и анизотропных магнетиков ($z \approx 2$, A -модель [1]). Очевидно, что такое изменение z от модели I к модели II связано со значительным усилением члена, описывающего одноионную анизотропию.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. C. Hohenberg and V. C. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435 (1977).
2. А. З. Паташинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
3. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
4. И. К. Камилов, Х. К. Алиев, *УФН* **168**, 953 (1998).
5. S. Wansleben and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6006 (1991).
6. P. Peczak and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **47**, 14260 (1993).
7. R. Marz, D. Hunter, and N. Jan, *J. Stat. Phys.* **74**, 903 (1994).
8. А. Н. Вакилов, В. В. Прудников, *Письма в ЖЭТФ* **55**, 709 (1992).
9. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *ЖЭТФ* **103**, 962 (1993).
10. О. Н. Марков, В. В. Прудников, *ФТТ* **37**, 1574 (1995).
11. E. J. Samuelsen, M. T. Hutchings, and G. Shirane, *Physica* **48**, 13 (1970).
12. А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, И. К. Камилов, К. Ш. Хизриев, *ФНТ* **24**, 462 (1998).
13. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, Х. К. Алиев, К. Ш. Хизриев, *ФТТ* **40**, 1661 (1998).
14. P. K. Hendriksen, S. Linderoth, and P.-A. Lindgard, *Phys. Rev. B* **48**, 7259 (1993).
15. M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 1142 (1977).
16. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).