

## Исследование критических свойств ортоферрита иттрия методами Монте-Карло

А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, Ж.Г. Ибаев

*Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук  
ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия,  
E-mail: m\_akai@iwt.ru*

Статья поступила в редакцию 20 мая 2004 г., после переработки 19 августа 2004 г.

Предложены модели, описывающие критические свойства ортоферрита иттрия. Модели исследованы методом Монте-Карло. Используя аппарат теории конечно-размерного скейлинга, вычислены основные статические критические индексы для рассмотренных моделей и определены их классы универсальности. Полученные результаты позволяют объяснить противоречие между экспериментально наблюдаемой и предсказанной теоретически картиной критического поведения ортоферрита иттрия. Показано, что модели  $YFeO_3$  в основном описываются изинговским классом универсальности критического поведения.

Запропоновано моделі, що описують критичні властивості ортоферита ітрія. Моделі досліджено методом Монте-Карло. За допомогою апарата теорії кінцево-розмірного скейлінга, обчислено основні статичні критичні індекси для розглянутих моделей і визначено їх класи універсальності. Отримані результати дозволяють пояснити суперечності між картиною критичного поведіння ортоферита ітрія, яка експериментально спостерігається та теоретично передбачена. Показано, що моделі  $YFeO_3$  в основному описуються ізінгівським класом універсальності критичного поведіння.

PACS: 05.70.Jk, 05.45.Pq

### 1. Введение

Количественное описание фазовых переходов и критических явлений в реальных решеточных системах остается одной из наиболее трудных задач современной теории конденсированного состояния. При этом для описания используют разнообразие теоретические методы: метод ренормализационной группы и  $\epsilon$ -разложение, высоко- и низкотемпературные разложения и др. [1–3]. С помощью этих методов на основе моделей Изинга, Гейзенберга и других получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком интервале изменения температур и других параметров. Однако большинство реальных систем не могут быть описаны моделями такого рода, и при их изучении приходится использовать значительно более сложные модели, что приводит к серьезным трудностям при исследовании традиционными теоретическими методами. Это и ряд других причин привело к тому, что для исследования фазовых переходов и

критических явлений в моделях сложных систем применяют методы Монте-Карло (МК) [4–6]. В данной работе методами Монте-Карло исследованы критические свойства моделей, предложенных нами для описания сложного слабоферромагнитного ортоферрита иттрия ( $YFeO_3$ ).

Интерес к моделям, описывающим критические свойства  $YFeO_3$ , обусловлен тем, что наличие взаимодействия Дзялошинского — Мория и одноионной анизотропии типа «легкая ось» на фоне сильных обменных взаимодействий приводит к сложной картине критического поведения, связанной с изменением его характера (кроссовер), что обусловлено слабыми дополнительными взаимодействиями. Наличие кроссоверов значительно усложняет экспериментальное исследование критической области и четкое определение критических параметров этого материала. С этим связана и противоречивость имеющихся экспериментальных данных, и невозможность однозначного определения класса универсальности кри-

тического поведения  $\text{YFeO}_3$  на их основе [7]. С другой стороны, это приводит к значительному разнообразию особенностей критического поведения материала и делает интересным его изучение с точки зрения физики.

## 2. Свойства $\text{YFeO}_3$ вблизи критической температуры

Ортоферрит иттрия имеет структуру искаженного перовскита, в котором антисимметричный обмен Дзялошинского–Мория создает поперечный слабый ферромагнетизм со спиновой конфигурацией  $G_x F_z$  или  $G_z F_x$  [8].

В достаточно широком интервале температур ниже критической температуры слабоферромагнитный момент  $\mathbf{F}$  и вектор антиферромагнетизма  $\mathbf{G}$  направлены вдоль осей  $Z$  и  $X$  соответственно [8]. Антиферромагнитное обменное взаимодействие упорядочивает магнитные моменты в плоскости, перпендикулярной оси  $Z$  [9,10], что позволяет отнести ортоферрит иттрия к магнетикам с  $XU$ -классом универсальности критического поведения. Значения критических параметров [11,12], рассчитанные на основе экспериментальных данных, свидетельствуют также, что по характеру критического поведения ортоферрит иттрия относится к  $XU$ -классу универсальности. Этот факт не согласуется с ожидаемым критическим поведением изинговского типа. Можно теоретически вычислить интервал температур, в котором должно преобладать изинговское критическое поведение, определив температуру кроссовера  $t_{cr} = (D_a/|J|)^{1/f}$  [7], где  $t = (T - T_c)/T_c$ ,  $f = 1,25$  при кроссовере от  $n = 3$  к  $n = 1$  ( $n$  – число компонент параметра порядка). Из этих данных следует, что  $t_{cr} = 3,38 \cdot 10^{-2}$  и, следовательно, при  $t \ll t_{cr}$  должно наблюдаться изинговское критическое поведение. Хотя интервал приведенных температур  $t < 3,38 \cdot 10^{-2}$  для  $\text{YFeO}_3$  легко достижим в экспериментах, ожидаемый характер критического поведения не наблюдается. Таким образом, существует противоречие между теоретически предсказанной и экспериментально наблюдаемой картиной.

## 3. Микроскопические модели ортоферрита иттрия

При построении моделей ортоферрита иттрия нами учитывались следующие магнитные и кристаллографические особенности этого материала [8,13]: в  $\text{YFeO}_3$  ионы  $\text{Y}$  диамагнитны, и их вкладом в критические свойства можно пренебречь, тогда магнитные свойства определяются только ионами  $\text{Fe}^{3+}$ ; в ортоферрите иттрия можно различить две подре-

шетки, в которых магнитные моменты антиферромагнитным обменом ориентированы в плоскости  $XU$ ; взаимодействие Дзялошинского–Мория приводит к скосу магнитных моментов подрешеток и появлению слабоферромагнитного момента, направленного по оси  $Z$ ; в  $\text{YFeO}_3$  существует одноионная анизотропия, направленная вдоль оси  $Z$ ; подрешетка ионов  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{YFeO}_3$  является почти кубической.

Учет этих особенностей позволяет записать гамильтониан этой системы в виде:

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

первый член учитывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ( $J < 0$ ) каждого из ионов  $\text{Fe}^{3+}$  со всеми ближайшими соседями; второй – взаимодействие Дзялошинского–Мория;  $\mathbf{d}$  – единичный вектор, направленный вдоль оси  $Z$ ; третий – одноионную анизотропию, направленную вдоль оси  $Z$  [8].

Согласно данным, полученным на основе теории молекулярного поля [7,8], 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  $\text{YFeO}_3$  нами рассмотрены три модели. Модель  $Y1$  учитывает обменное взаимодействие каждого иона  $\text{Fe}^{3+}$  с ближайшими соседями и одноионную анизотропию; модель  $Y2$  учитывает обменное взаимодействие ионов  $\text{Fe}^{3+}$  с ближайшими соседями и взаимодействие Дзялошинского–Мория; модель  $Y3$  учитывает обменное взаимодействие, одноионную анизотропию и взаимодействие Дзялошинского–Мория.

## 4. Метод исследования и конечно-размерный скейлинг

Для проведения расчетов формировались системы кубической формы с линейными размерами  $L \times L \times L$  ( $L = 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26, 28, 30$ ). Эффективное число спинов в системе  $N_{eff}$  составляло 512–27000. При моделировании системы добавлялись периодические граничные условия, и все расчеты проводились с использованием стандартного алгоритма Метрополиса [6].

На ПК генерировались марковские цепи длиной до  $1,0 \cdot 10^6$  МКшагов/спин, вдоль которых и выполнялось усреднение. Для приведения системы в состояние термодинамического равновесия отсекали

неравновесные участки длиной до  $4,0 \cdot 10^4$  МКшагов/спин.

Для непосредственного вычисления критических параметров использованы соотношения теории конечно-размерного скейлинга (КРС) (см. ссылки в [6,14]).

Основные положения теории КРС сводятся к учету влияния конечных ( $L \ll \infty$ ) размеров систем, изучаемых методами Монте-Карло. В соответствии с этой теорией свободная энергия достаточно большой системы ( $L \gg 1$ ) с периодическими граничными условиями при температуре, близкой к  $T_c$  ( $T \rightarrow T_c$ ), масштабируется следующим образом:

$$F(T, L) = L^{-d} F(tL^{1/\nu}), \quad (2)$$

где  $d$  — размерность пространства,  $T_c = T_c(L = \infty)$ ,  $\nu$  — статистический критический индекс радиуса корреляции бесконечно большой системы.

Следствием (2) являются следующие зависимости для теплоемкости, восприимчивости и намагниченности, приходящихся на один спин:

$$C(T, L) \approx L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (3)$$

$$\chi(T, L) \approx L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (4)$$

$$m(T, L) \approx L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}). \quad (5)$$

Соотношения (3)–(5) описывают критическое поведение бесконечно больших систем при  $t \ll 1$  и  $L \rightarrow \infty$ .

Значение теории КРС возросло после того как для расчета критической температуры стали использовать метод кумулянтов Биндера [15]. Согласно теории КРС, кумулянты  $U_L$

$$U_L = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2, \quad (6)$$

для систем с разными размерами  $L$  пересекаются в критической точке  $T_c$ . Таким образом, построив температурные зависимости  $U_L$  для систем с разными размерами  $L$ , можно с высокой степенью точности вычислить критические температуры.

### 5. Статические критические свойства моделей

Температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости описываются с помощью выражений [16]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (7)$$

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (8)$$

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

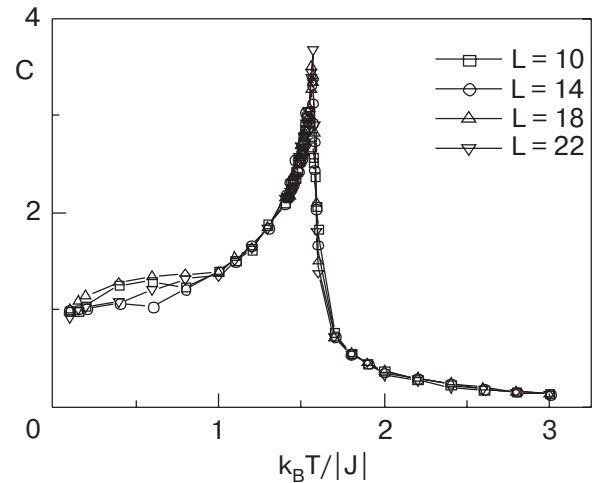


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости  $C$  в модели  $Y2$ .

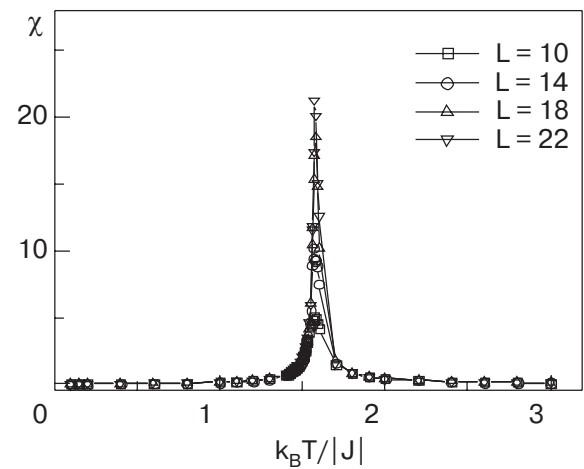


Рис. 2. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры в модели  $Y2$ .

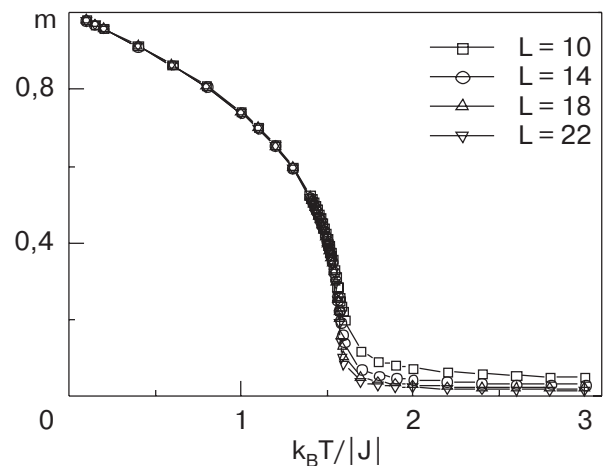


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности  $m$  в модели  $Y2$ .

На рис. 1–3 представлены температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и намагниченности, рассчитанные с помощью модели  $Y2$ . Та-

кие же зависимости наблюдаются и для двух других моделей. На рисунках видно, что на всех температурных зависимостях величин имеются ярко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Отсутствие смещения максимумов теплоемкости и восприимчивости с изменением  $L$ , их хорошее совпадение между собой по температуре и со значениями, определенными методом кумулянтов Биндера, свидетельствует о надежности определения критической температуры.

Характерная зависимость кумулянтов Биндера от температуры для систем с разными линейными размерами показана на рис. 4. Точка пересечения этих кривых является критической точкой. Определенные таким образом температуры для моделей Y1, Y2 и Y3 имеют соответственно значения  $k_B T_c / |J| = 1,440(2)$ ,  $k_B T_c / |J| = 1,573(2)$  и  $k_B T_c / |J| = 1,563(2)$ . Эти значения хорошо согласуются с температурами  $T_c$ , определенными по максимумам температурных зависимостей теплоемкости и восприимчивости.

Для расчета критических параметров восприимчивости и намагниченности нами использованы соотношения (4), (5). Из этих выражений следует, что при  $T = T_c$  и достаточно больших  $L$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (9)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (10)$$

Таким образом, наклон прямой в логарифмических зависимостях  $\chi$  и  $m$  от  $L$  дает значения  $\gamma/\nu$  и  $\beta/\nu$ . Зная значения  $\nu$  для соответствующих моделей, легко определить  $\gamma$  и  $\beta$ . Характерная зависимость восприимчивости от  $L$  для модели Y2 показана на рис. 5. Это и аналогичные данные для моделей Y1 и

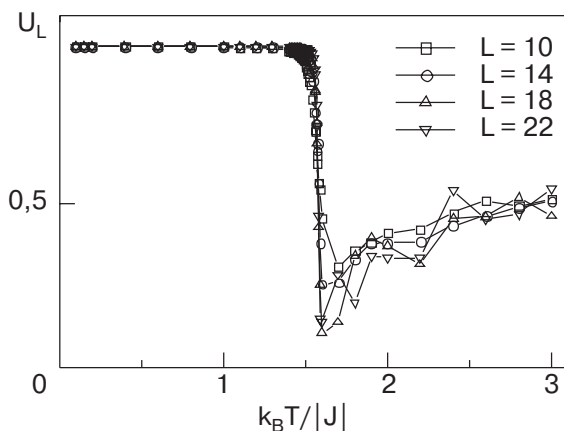


Рис. 4. Зависимость кумулянтов Биндера  $U_L$  от температуры в модели Y2.

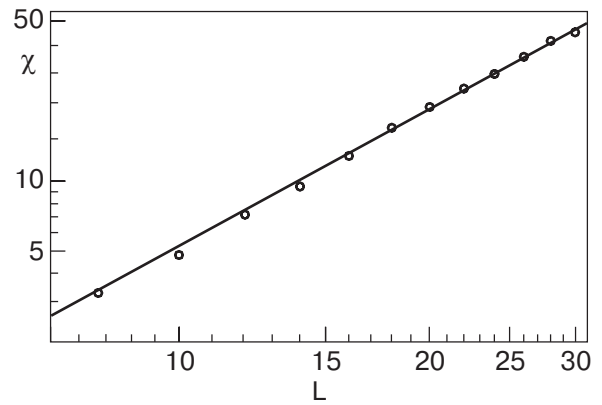


Рис. 5. Логарифмическая зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  для модели Y2.

Y3, а также для намагниченности во всех трех моделях были использованы для расчета индексов  $\gamma$  и  $\beta$ .

Удивительным фактом является то, что для теплоемкости закономерность типа (9), (10) несправедлива, с чем сталкивались исследователи и ранее [17], но особого значения этому не придавали, считая, что это присуще только некоторым моделям. Позднее в работе [4] было убедительно показано, что такое поведение теплоемкости присуще гораздо более широкому классу моделей. Поэтому на практике для расчета критического индекса  $\alpha$  используют соотношения

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (11)$$

где  $a$  — некоторый коэффициент. Другой важный вопрос, который возникает при использовании выражений (9)–(11), это выбор  $\nu$ . В самом деле, после того как определены конкретные значения  $\gamma/\nu$ ,  $\beta/\nu$  и  $\alpha/\nu$  от выбранного значения  $\nu$  зависит, чему будут равны индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . В простых моделях (Изинг, XY-модель или Гейзенберг) проблема решается просто: для перечисленных моделей необходимо использовать соответствующие значения —  $\nu = 0,63$ ,  $\nu = 0,67$ ,  $\nu = 0,71$  [18,19]. Ситуация изменяется в сложных моделях, в которых возможны кроссоверные переходы. Этот вопрос является довольно интересным и требует некоторых пояснений.

При обработке данных для сложных моделей, как правило, используют значение, соответствующее главному члену в гамильтониане, например, для гамильтониана (1) это член, описывающий сильные изотропные обменные взаимодействия, и для него  $\nu = 0,71$  (модель Гейзенберга). Но в нашем случае для расчета критических индексов используются данные, полученные при  $T = T_c$ . Следовательно, в этом случае характер критического поведения определяется дополнительными взаимодействиями (на-

пример, взаимодействием Дзялошинского – Мория, анизотропией и др.) и выбор  $\nu$  должен соответствовать характеру этих взаимодействий. Таким образом, для всех трех изучаемых моделей следует использовать значение  $\nu = 0,63$ , соответствующее модели Изинга, так как все дополнительные взаимодействия в моделях  $Y1, Y2$  и  $Y3$  в  $T_c$  формируют изинговское критическое поведение. На основе выражений (9)–(11) для рассматриваемых нами моделей получены следующие значения:

модель  $Y1$ :  $\alpha/\nu = 0,162(2)$ ,  $\gamma/\nu = 1,874(4)$ ,  $\beta/\nu = 0,473(4)$ ;

модель  $Y2$ :  $\alpha/\nu = -0,073$ ,  $\gamma/\nu = 1,972$ ,  $\beta/\nu = 0,443$ ;

модель  $Y3$ :  $\alpha/\nu = 0,151$ ,  $\gamma/\nu = 1,932$ ,  $\beta/\nu = 0,451$ .

Из этих данных при  $\nu = 0,63$  следуют следующие наборы индексов:

для  $Y1$ :  $\alpha = 0,10(2)$ ,  $\gamma = 1,21(4)$ ,  $\beta = 0,30(2)$ ;

для  $Y2$ :  $\alpha = -0,04$ ,  $\gamma = 1,24$ ,  $\beta = 0,32$ ;

для  $Y3$ :  $\alpha = 0,09$ ,  $\gamma = 1,22$ ,  $\beta = 0,30$ .

Значения критических индексов, полученных для моделей  $Y1$  и  $Y3$ , соответствуют модели Изинга и в пределах погрешности совпадают с теоретическими значениями ( $\alpha = 0,108$ ,  $\gamma = 1,24$ ,  $\beta = 0,326$  [18,19]). Изинговский характер критического поведения этих моделей согласуется с характером, ожидаемым из вида гамильтониана, так как для обеих моделей в гамильтонианах учитывается одноионная анизотропия, которая в  $T_c$  формирует соответствующее поведение. Данные для модели  $Y2$  не согласуются ни с одной из известных моделей. В сложных моделях с кроссоверными переходами это может быть в двух случаях: либо индексы вычислены в кроссоверной области, которая не достигла асимптотической критической области; либо для этой модели характер критического поведения  $C$ ,  $\chi$  и  $m$  отличается от ожидаемого, и необходим перерасчет критических параметров.

Первый случай, по-видимому, можно исключить, так как модели  $Y1$  и  $Y3$ , изученные в тех же режимах, не содержат никаких противоречий. Зато перерасчет данных с учетом  $\nu = 0,67$  ( $XU$ -модель) и  $\nu = 0,71$  (модель Гейзенберга) дает следующие наборы индексов:

$\alpha = -0,04(2)$ ,  $\gamma = 1,32(4)$ ,  $\beta = 0,32(2)$  при  $\nu = 0,67$ ;

$\alpha = -0,05(2)$ ,  $\gamma = 1,39(4)$ ,  $\beta = 0,35(2)$  при  $\nu = 0,71$ .

Очевидно, что значения индексов из второго набора хотя и близки к теоретически предсказанным для модели Гейзенберга, но не совпадают с ними. Зато значения  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , полученные при  $\nu = 0,67$ , хорошо согласуются с результатами для  $XU$ -модели и в пределах погрешности совпадают с ними.

Поведение, характерное для  $XU$ -класса универсальности в  $YFeO_3$ , обнаружено экспериментально [11,12,20]. В этих работах критическое поведение

ортоферрита иттрия изучалось в основном методом мессбауэровской спектроскопии, который позволяет изучать характер флуктуаций подрешеточной намагниченности, магнитные моменты которых антиферромагнитным обменом ориентированы в плоскости, перпендикулярной оси  $Z$ . Полученные значения критических индексов для модели  $Y2$  и экспериментальные данные свидетельствуют, что флуктуации магнитных моментов  $YFeO_3$  в основном происходят в плоскости  $XU$ . Учет одноионной анизотропии в модели  $Y3$ , наряду с взаимодействием Дзялошинского – Мория, формирует изинговский характер критического поведения, так как направления слабоферромагнитного момента и одноосной анизотропии совпадают. В экспериментах это не наблюдается, поскольку выход на асимптотический критический режим в лабораторных исследованиях чрезвычайно затруднен из-за целого ряда серьезных трудностей, с которыми сталкиваются такого рода эксперименты [7].

### Заключение

В заключение отметим, что модели  $Y1$  и  $Y3$ , в которых наряду с другими взаимодействиями учитывается одноионная анизотропия, принадлежат к изинговскому классу универсальности ( $d = 3$ ,  $n = 1$ ).

Модель  $Y2$ , в которой вместе с обменом учитывается взаимодействие Дзялошинского – Мория, принадлежит к  $XU$ -классу универсальности ( $d = 3$ ,  $n = 2$ ). Очевидно, что, несмотря на слабый магнитный момент, направленный вдоль оси  $Z$ , в этой модели критические флуктуации носят двумерный характер, вследствие чего наблюдают критическое поведение, характерное для  $XU$ -модели.

Работа поддержана грантом РФФИ (№04-02-16487), ФЦП «Интеграция» (проект № И0228/1532), грантом для поддержки ведущих научных школ (№НШ-2253.2003.2), и Фонда содействия отечественной науке (Муртазаев А.К.).

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 (1973).
4. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.А. Магомедов, *ЖЭТФ* **120**, 1535 (2001).
5. P. Peczak and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 1048 (1991); P. Peczak and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B47**, 14260 (1993).
6. И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев, *УФН* **169**, 773 (1999).

7. И.К. Камилов, Х.К. Алиев, *Статические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах*, Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).
8. К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).
9. И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **32**, 1547 (1957).
10. Т. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
11. M. Eibschutz, S. Shtrikman, and D. Treves, *Phys. Rev.* **152**, 562 (1967).
12. В.М. Черепанов, С.С. Якимов, *Письма в ЖЭТФ* **19**, 764 (1974).
13. Е.А. Туров, В.Е. Найш, *ФММ* **9**, 10 (1960); *ФММ* **11**, 321 (1961);
14. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1980).
15. K. Binder, *Z. Phys.* **B43**, 119 (1981).
16. P. Peczak, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).
17. P. Peczak, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6097 (1991).
18. S.A. Antonenko and A.I. Sokolov, *Phys. Rev.* **E51**, 1894 (1995).
19. J.J.C. La Gulluo and J. Zinn-Justin, *J. Phys. Lett. (Paris)* **46**, L137 (1985)
20. А.Л. Иршинский, В.И. Ожогин, *ЖЭТФ* **76**, 1111 (1980).

Monte-Carlo study into critical properties of orthoferrite yttrium

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

Models of real orthoferrite yttrium are proposed. The critical properties of these models are investigated by using the Monte-Carlo method. On the basis of the finite size scaling theory the static critical exponents are calculated and their classes of universality are determined. The results obtained allow an explanation of the contradiction between the experimentally observed critical behavior and that predicted theoretically. It is shown that the models of  $YFeO_3$ , are mainly described by Ising's class of universality of critical behavior.