

Критическое поведение теплоемкости малых магнитных частиц Cr_2O_3

© А.К. Муртазаев, И.К. Камиллов, Х.К. Алиев, К.Ш. Хизриев

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук,
367003 Махачкала, Россия(Поступила в Редакцию 30 сентября 1997 г.
В окончательной редакции 23 января 1998 г.)

Методом Монте-Карло исследовано критическое поведение теплоемкости малых магнитных частиц реального антиферромагнетика Cr_2O_3 . Рассчитаны критические индексы $\alpha = -0.17 \pm 0.03$ и отношение критических амплитуд $A/A' = 1.03 \pm 0.07$ для частиц, содержащих от $N = 286$ до 2502 спинов

Исследование особенностей фазовых переходов в трехмерных системах на основе микроскопических гамма-тоннианов все еще является важной задачей современной теории фазовых переходов и критических явлений [1].

Такого рода исследования особенно актуальны для малых частиц [2], где строгие аналитические расчеты магнитных и тепловых характеристик сильно затруднены как необходимостью правильного учета в теории сильных межспиновых взаимодействий, так и невозможностью использовать в расчетах переход к термодинамическому пределу. Лабораторные эксперименты также сталкиваются с большими трудностями и при их постановке, и при интерпретации результатов [2]. Практически все эти трудности могут быть преодолены при изучении малых систем методами Монте-Карло [3,4]. Методом Монте-Карло в основном изучались простые ферромагнитные модельные системы с взаимодействием между ближайшими соседями. Значительно менее полно изучены реальные антиферромагнитные системы с учетом конкретной кристаллографической структуры и других параметров.

Нами рассматриваются малые частицы реального антиферромагнетика Cr_2O_3 с ромбоэдрической решеткой. При этом пространственные, обменные и другие величины соответствуют реальным образцам Cr_2O_3 . Гамильтониан системы может быть представлен в виде [5]

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

$$|\mu_i| = 1,$$

где, согласно экспериментальным данным [6], J_1 — параметр взаимодействия каждого спина с одним ближайшим соседом, а J_2 — с тремя следующими ($J_2 = 0.45J_1$, $J_1 < 0$, $J_2 < 0$). Различные релятивистские взаимодействия аппроксимировались эффективной одноионной анизотропией $D_0 > 0$, соотношение между анизотропией и обменом полагалось равным 0.025.

Расчеты проводились для частиц сферической формы с диаметрами $d = 24.0, 28.4, 32.8, 34.8, 41.82, 46.4, 48.64 \text{ \AA}$, число спинов в частицах равнялось соответственно $N = 286, 508, 760, 908, 1602, 2170, 2502$. При этом на ЭВМ генерировались марковские цепи длиной от $2 \cdot 10^4$ до 10^5 шагов Монте-Карло на спин.

Одна из особенностей малых частиц состоит в том, что они имеют относительно большую долю поверхностных элементов и многие их свойства в значительной мере обусловлены именно наличием поверхности [2]. В рассматриваемых нами частицах доля поверхностных спинов менялась от 46.8% для самой маленькой частицы до 22.8% для частицы с $N = 2502$.

Наблюдение за температурным ходом теплоемкости осуществлялось с использованием выражения [7]

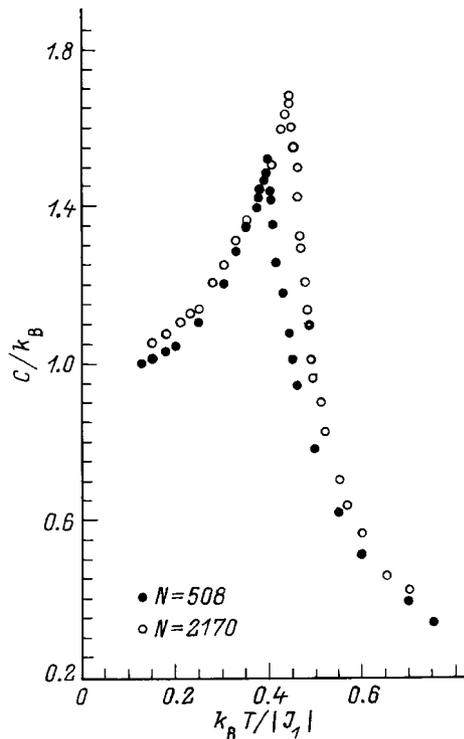
$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (2)$$

где $K = J_1/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, N — число частиц, U — внутренняя энергия, угловые скобки означают усреднение по каноническому ансамблю. Температурные зависимости теплоемкости для всех изучаемых частиц дают четко выраженные максимумы в критической области. На рисунке представлены данные зависимости теплоемкости от температуры для двух частиц: $N = 508$ и 2170. Как видно из рисунка, с увеличением числа частиц в системе максимум теплоемкости растет и смещается в сторону более высоких температур, что является характерной чертой малых частиц и согласуется с данными других авторов [3].

Для аппроксимации критического поведения удельной теплоемкости использовалось выражение [8]

$$C = \frac{A}{\alpha} (|t|^{-\alpha} - 1) + D|t|^x, \quad (3)$$

где $t = |T - T_N|/T_N$, α , A , D — подгоночные параметры для $T > T_N$. Эти же величины со штрихами относятся к случаю $T < T_N$. Показатель степени x задавался равным 0.55, что соответствует значению, полученному для модели Гейзенберга теоретически и экспериментально [9]. Обработка данных методом Монте-Карло проводилась нелинейным методом наименьших квадратов. Выбор подгоночного выражения (3) из нескольких возможных [8] был обусловлен тем, что оно обеспечивает наименьшее значение среднеквадратичного отклонения. Использование других подгоночных выражений приводит к тому, что параметры α , A , D слегка меняются, хотя в пределах погрешности и совпадают с полученными на основе выражения (3), но при этом погрешность вычислений несколько выше.



Зависимость теплоемкости малых магнитных частиц Cr_2O_3 от температуры.

В качестве оптимальных значений α , A , D принимались данные, минимизирующие среднеквадратичное отклонение. Критические температуры определялись по максимумам теплоемкости, при этом расчеты проводились и с варьированием значений T_N . В качестве T_N выбиралась температура, соответствующая минимальной величине дисперсии. В целом диапазон изменения приведенной температуры t , в котором определялись α , A , D , лежал в пределах от $t_{\min} = 5 \cdot 10^{-3}$ до $t_{\max} = 0.75$. В этом диапазоне эффективные значения критического индекса α для всех частиц примерно одинаковы и имеют значения $\alpha = -0.17 \pm 0.03$. Теоретические значения α для модели Гейзенберга и модели Изинга соответственно равны -0.126 и 0.108 [9]. Для макрообразцов Cr_2O_3 имеются и результаты экспериментальных исследований критического поведения теплоемкости с расчетом α . При этом у разных авторов и по данным, полученным различными методами измерения, критический индекс α меняется от $\alpha = 0.14$ до -0.12 [10]. Отметим также, что по нашим данным величина α меняется лишь в пределах погрешности и при изменении нижней границы диапазона t_{\min} от $5 \cdot 10^{-3}$ до $3 \cdot 10^{-2}$.

При обработке данных, соответствующих низкотемпературной фазе, на основе предсказаний статического скейлинга [1] полагалось, что $\alpha' = \alpha$, а затем подбирались соответствующие A' и D' . Соотношение между критическими амплитудами A и A' , определенное по указанной схеме для частиц всех размеров, принимает значение $A/A' = 1.03 \pm 0.07$. Таким образом, крити-

ческое поведение удельной теплоемкости ультрамалых частиц Cr_2O_3 , содержащих $N = 286-2502$ спинов, в исследованном интервале температур практически не зависит от числа взаимодействующих спинов и соответственно от их доли в поверхностном слое.

В рассмотренном нами температурном интервале не обнаруживается кроссовер от гейзенберговского критического поведения к изинговскому, который, согласно данным гамильтониана, ожидался при $t = t_{\text{cr}} \approx 0.052$. Как было установлено в работе [5], поверхностные спины малых магнитных частиц даже при температурах значительно ниже T_N свободно переориентируются. Такое поведение спинов больше соответствует модели Гейзенберга, и мы полагаем, что это приводит к расширению интервала температур с гейзенберговским критическим поведением и к смещению температуры кроссовера t_{cr} к точке Нееля.

Список литературы

- [1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
- [2] Ю.И. Петров. Физика малых частиц. Наука, М. (1982).
- [3] К. Биндер. Методы Монте-Карло в статической физике. Мир, М. (1982).
- [4] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статической физике. Наука, М. (1995).
- [5] А.К. Муртазаев, И.А. Фаворский. ФНТ **19**, 2, 160 (1993).
- [6] E.J. Sumuelsen, M.T. Hutchings, G. Shirane. Physica **48**, 8, 13 (1970).
- [7] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. **B43**, 7, 6087 (1991).
- [8] G. Bednarz, D.J.W. Geldart, M.A. White. Phys. Rev. **B47**, 21, 14 247 (1993).
- [9] J.C. Le Guillio, J. Zinn-Justin. J. Phys. Lett. **46**, L137 (1985).
- [10] M. Marinelli, F. Mercuri, U. Zammit, R. Pizzoferrato, F. Scudieri. Phys. Rev. **B49**, 14, 9523 (1994).