

## Статистические критические свойства моделей гадолиния

© А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, К.Ш. Хизриев

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук,  
367003 Махачкала, Россия

E-mail: kamilov@datacom.ru

(Поступила в Редакцию 10 июля 2000 г.)

Предложены микроскопические модели реального ферромагнитного гадолиния и методом Монте-Карло исследованы их критические свойства. Рассчитаны критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$  и намагниченности  $\beta$ . Индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  рассчитаны как аппроксимацией данных на основе традиционных степенных функций, так и с использованием теории конечно-размерного скейлинга. Установлено, что на характер критического поведения гадолиния оказывают влияние и диполь-дипольные взаимодействия. Показано, что метод Монте-Карло является эффективным инструментом исследования критических свойств сложных моделей, в которых два типа слабых релятивистских взаимодействий учитываются одновременно на фоне друг друга.

Институт физики Дагестанского научного центра РАН.

Наиболее плодотворными в построении единой теории фазовых переходов и критических явлений оказались идеи, заложенные в гипотезах скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы (РГ) [1–2]. На основе теории РГ и  $\epsilon$ -разложения получены наиболее точные и надежные численные значения критических индексов [3–4]. Теория РГ до сих пор остается одним из самых эффективных инструментов количественного изучения критических явлений. Тем не менее и эта теория сталкивается с большими трудностями при исследовании сложных моделей, в которых необходимо учитывать многочисленные факторы, присущие реальным системам, но не учитываемые в моделях первого приближения (классические модели Изинга, Гейзенберга и т.д.). К подобным факторам могут быть отнесены анизотропия, примеси, многоспиновый обмен, диполь-дипольное взаимодействие, колебания решетки и ряд других [2]. В то же время современный этап исследования фазовых переходов и критических явлений как раз характеризуется изучением более сложных и реалистичных моделей [5–6]. Кроме того, подход, лежащий в основе теории РГ, не является чисто микроскопическим [7].

Эти и некоторые другие причины привели к тому, что фазовые переходы и критические явления в настоящее время интенсивно исследуются методами Монте-Карло (МК) [5–6,8–10].

Количественное изучение непосредственно самой критической области методами МК стало возможно только в последние годы. Тем не менее результаты, полученные этими методами, к настоящему времени не уступают по точности лучшим данным других методов, а иногда и превосходят их [5–10]. Вычислительные мощности современных компьютеров и использование специальных алгоритмов в некоторых случаях позволяет рассчитывать критические параметры непосредственно из МК данных, не используя при этом различные трюки и технические приемы [5,11].

Лабораторные эксперименты, выполняемые в непосредственной близости к критической точке, слишком

сложны и пока не позволяют достичь требуемой для теории точности, получить ответы на ряд важных вопросов. К тому же среди магнетиков имеются материалы, изучение критического поведения которых сталкивается с особыми трудностями. Одним из таких материалов является редкоземельный металл гадолиний. Целый ряд экспериментальных исследований, направленных на определение характера и особенностей критического поведения гадолиния, пока не позволил получить ответ на все вопросы.

Нами предложены и исследованы методом МК микроскопические модели реального ферромагнитного гадолиния. Особенность данного исследования заключается в том, что эти модели учитывают разные типы слабых релятивистских взаимодействий на фоне друг друга, а изучается влияние этих взаимодействий на характер критического поведения. В такой постановке задача интересна с точки зрения методики исследования критических явлений и выявления возможностей метода МК в обнаружении влияния на них слабых факторов.

### 1. Критические свойства гадолиния

Гадолиний — редкоземельный металл, имеющий плотноупакованную гексагональную структуру. В интервале температур  $232\text{ K} < T < T_c \cong 293\text{ K}$  в нем реализуется простое ферромагнитное упорядочение. Магнитные и нейтронографические исследования показывают, что за анизотропией в Cd ответственны как одноионный, так и двухионный механизмы, а в парамагнитной фазе она обусловлена одноосной анизотропией ближнего магнитного порядка [12–14]. С одной стороны, гадолиний является одноосным слабоанизотропным ферромагнетиком, поэтому его критическое поведение при температурах, достаточно близких к  $T_c$ , может носить изинговский характер. С другой стороны, сферически-симметричное распределение электронной плотности и отсутствие орбитального момента приводит к изотропному обменному

взаимодействию, что предполагает гейзенберговский характер критического поведения.

Экспериментальному исследованию статистического критического поведения гадолия посвящено большое число работ [14–24]. Из измерений теплового расширения [14,15] теплоемкости [16–18], магнитных свойств [19–23], мессбауэровских исследований [24], проведенных на различных моно- и поликристаллических образцах, был определен набор статических критических индексов  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ . Таблицы, где собраны значения этих индексов, приведены в работах [23–25]. Сравнение экспериментальных данных с теоретическими предсказаниями трехмерных моделей Изинга и Гейзенберга показывает их противоречивость. Из значений критических индексов теплоемкости  $\alpha$  и теплового расширения следует, что гадолий является либо гейзенберговским, либо изотропным дипольным магнетиком. Что касается  $\beta$ , во всех исследованиях температурная зависимость самопроизвольной намагниченности  $M_s$ , характеризуемая индексом  $\beta$ , также соответствует либо гейзенберговскому, либо изотропному дипольному магнетиком. В то же время значение критического индекса восприимчивости  $\gamma$  ближе к характерным значениям модели Изинга. А индекс  $\delta$  не соответствует данным ни микроскопических теорий, ни теории молекулярного поля. Таким образом, возникает вопрос — чем объяснить такой характер критического поведения гадолия, когда одни критические индексы соответствуют одной модели, другие — другой.

Анализ экспериментальных данных показывает, что эти несоответствия могут быть обусловлены следующими основными причинами.

1) Причины, связанные с методикой определения тех или иных критических индексов [23]. В большинстве работ критические индексы  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  определялись подгонкой экспериментальных  $M-H-T$ -данных под скейлинговое уравнение состояния для намагниченности, которое предполагает выполнение закона подобия  $\gamma = \beta(\delta - 1)$ . При таком определении критические индексы должны удовлетворять законам подобия, в которые входят те же самые индексы  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\delta$ . Но в отдельности их значения могут и не соответствовать истинному асимптотическому критическому поведению.

2) В реальных кристаллах всегда есть добавочные взаимодействия, возмущающие исходное критическое поведение. Например, присутствие в гейзенберговских магнетиках изотропных дипольных взаимодействий приводит к зависимости индекса  $\gamma$  от приведенной температуры [23].

3) Как показали недавние эксперименты, проведенные на разных образцах гадолия, существенное влияние оказывают дефекты, которые могут изменить характер критического поведения [18].

4) Как оказалось, на критические свойства гадолия, в частности, на ширину и высоту пика теплоемкости, влияет техника приготовления образца [18].

5) Теоретические оценки получены для статических моделей, где фиксированы значения геометрических параметров решетки, углы, положения атомов и т.д. В то

же время при исследовании реальных образцов в лабораторных экспериментах эти величины могут меняться, в результате чего может произойти изменение параметров взаимодействия. В некоторых случаях это может привести к несоответствию теоретических и экспериментальных знаний.

Отметим, что тщательные экспериментальные исследования статических критических свойств гадолия выполнены в работе [23], где определены значения индексов  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ . Особенности поведения теплоемкости изучены в [18]. Результаты этой работы показывают, что критическое поведение теплоемкости весьма чувствительно к способу приготовления образца, к его чистоте и химическому составу.

Тем не менее отметим, что не все указанные выше факторы могут быть устранены или учтены в ходе выполнения лабораторных экспериментов. Для этого нужен эксперимент, где все параметры заданы и находятся под строгим контролем. Эти условия может обеспечить лишь численный эксперимент (метод Монте-Карло).

## 2. Микроскопические модели гадолия

При построении моделей гадолия необходимо иметь в виду следующие особенности этого материала: 1) электронная плотность распределена сферически-симметрично, орбитальный момент отсутствует; 2) энергия магнитной кристаллографической анизотропии у гадолия значительно меньше, чем у других редкоземельных элементов; 3) в гадолии в критической области существенную роль могут играть изотропные диполь-дипольные взаимодействия.

С учетом этих особенностей гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J(\boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\mu}_j) - D_A \sum_i (\mu_i)^2 - D_d \sum_i (\langle \mathbf{M} \rangle \cdot \boldsymbol{\mu}_i),$$

$$|\boldsymbol{\mu}_i| = 1, \quad (1)$$

где первый член учитывает обменное взаимодействие каждого из ионов  $Gd^{3+}$  со всеми ближайшими соседями ( $J > 0$ ), второй — одноименную анизотропию ( $D_A$ ), третий — изотропное диполь-дипольное взаимодействие ( $D_d$ ). Согласно данным, полученным на основе теории молекулярного поля [12,23,26,27], параметры анизотропии  $D_A$  и изотропных дипольных сил  $D_d$  имеют значения  $D_A = 1.41 \times 10^{-4}$  и  $D_d = 1.35 \times 10^{-3}$ .

Расчеты проводились методом МК для образцов кубической формы размерами  $L \times L \times L$  ( $L = 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20$ ) с периодическими граничными условиями. При формировании моделируемых систем учитывались все магнитные и кристаллографические особенности реального гадолия. Для вывода системы в равновесное состояние отсекались участки марковской цепи длиной до  $2.5 \times 10^4$  МКшагов/спин. Усреднение выполнялось по марковской цепи длиной до  $1.2 \times 10^5$  МКшагов/спин.

Для выяснения степени влияния дипольных сил на характер критического поведения рассматривались две модели гадолиния. Модель Г1 учитывает обменное взаимодействие с ближайшими соседями и одноосную анизотропию; модель Г2 дополнительно учитывает изотропные диполь-дипольные взаимодействия. Отметим, что исследование влияния слабых взаимодействий различного типа на фоне друг друга на характер критического поведения методами МК ранее не проводилось, возможности и "чувствительность" метода МК в этом плане не были изучены.

### 3. Статические критические свойства моделей гадолиния

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения

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

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

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $U$  — внутренняя энергия,  $m$  — намагниченность. На рис. 1 и 2 представлены зависимости теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  от температуры для модели Г1. Отметим, что все зависимости имеют ярко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру.

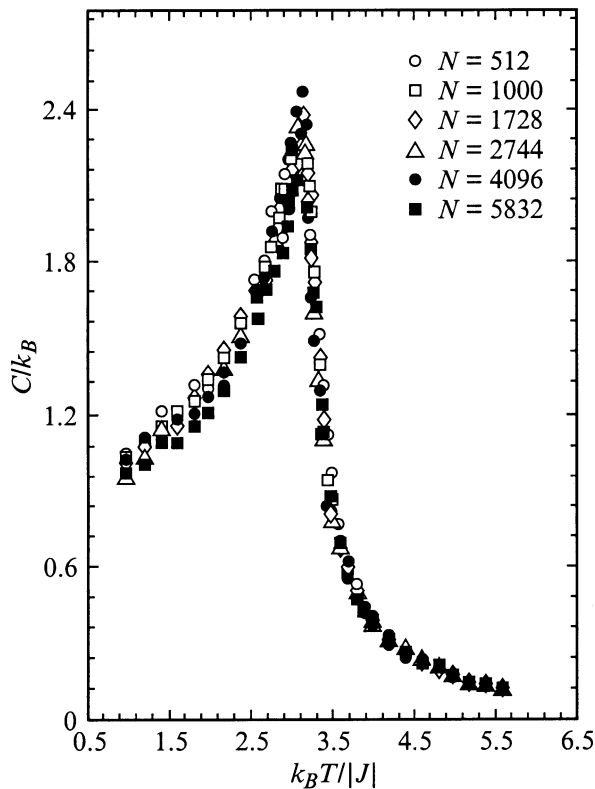


Рис. 1. Зависимость теплоемкости от температуры для модели Г1.

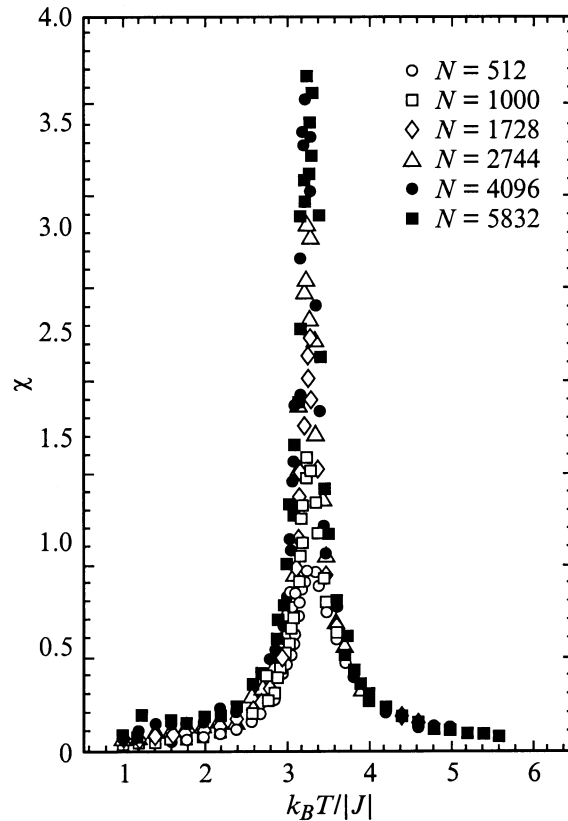


Рис. 2. Зависимость восприимчивости от температуры для модели Г1.

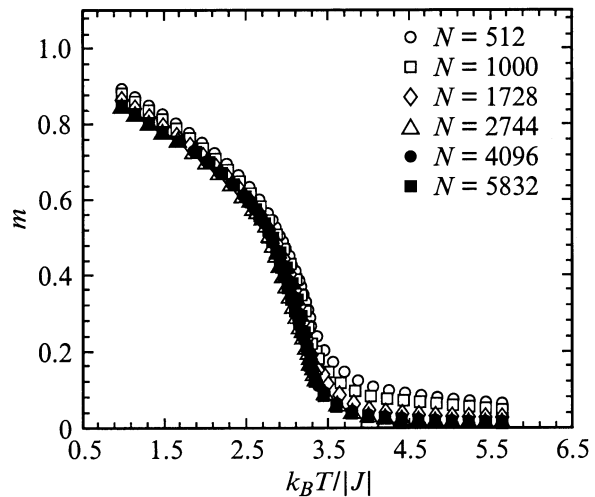


Рис. 3. Зависимость намагниченности от температуры для модели Г1.

На рис. 3 показана зависимость намагниченности  $m$  от температуры для модели Г1. Наблюдается монотонное уменьшение величины  $m$  с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных "хвостов" при увеличении числа спинов  $N$ . Для определения критической температуры использовался метод кумулянтов Бин-

**Таблица 1.** Эффективные значения критического индекса теплоемкости  $\alpha$  гадолия (модель Г1,  $t_{\min} = 3.0 \times 10^{-3}$ )

N	$t_{\max}$							
	$5 \times 10^{-1}$	$4 \times 10^{-1}$	$3 \times 10^{-1}$	$2 \times 10^{-1}$	$1 \times 10^{-1}$	$0.9 \times 10^{-1}$	$0.8 \times 10^{-1}$	$0.7 \times 10^{-1}$
512	-0.18(2)	-0.16	-0.13	-0.08	-0.02	0.02	0.06	0.08
1000	-0.18	-0.15	-0.12	-0.09	-0.03	0.01	0.05	0.07
1728	-0.16	-0.14	-0.10	-0.06	-0.01	0.02	0.06	0.08
2744	-0.17	-0.15	-0.09	-0.07	-0.02	0.00	0.04	0.07
4096	-0.15	-0.13	-0.10	-0.04	-0.02	0.01	0.04	0.07
5832	-0.14	-0.12	-0.09	-0.04	-0.01	0.03	0.05	0.08

дера [5]. Согласно теории конечно-размерного скейлинга (см. ссылки в [5]), кумулянты  $U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / 3 \langle M^2 \rangle^2$  для систем с разными размерами  $L$  пересекаются в критической точке  $T_c$ . Определенная таким образом температура  $k_B T_c / |J| = 3.22$  (2) использовалась в дальнейшем в качестве критической. Зависимость кумулянтов Биндера  $U_L$  от температуры для модели Г1 при различных значениях  $N$  демонстрирует рис. 4.

Аналогичные расчеты были выполнены и для модели Г2. Качественно все особенности, характерные для модели Г1 и представленные на рис. 1–4, повторяются и для модели Г2. Отличие в зависимости  $C$  и  $\chi$  от температуры для модели Г1 и Г2 состоит в том, что максимумы в модели Г2 несколько ниже, чем в модели Г1. Критическая температура  $T_c$  для обеих моделей в пределах погрешности совпадает.

Для аппроксимации критического поведения теплоемкости использовались выражения [18].

$$C = \frac{A}{\alpha} |t|^{-\alpha} (1 + a_c |t|^x) + R|t| + E, \quad (4)$$

$$C = \frac{A}{\alpha} (|t|^{-\alpha} - 1) + a_c |t|^x + R|t| + E, \quad (5)$$

где  $t = |T - T_c| / T_c$ ;  $\alpha$  — критический индекс теплоемкости;  $A$ ,  $a_c$ ,  $R$ ,  $E$  — подгоночные параметры. Значение  $x$  полагалось равным 0.55 [3]. Обработка данных проводилась с использованием нелинейного метода наименьших квадратов. Для обеих моделей гадолия выражения (4) и (5) дают значения критических параметров, которые в пределах погрешности совпадают, но при этом выражение (5) обеспечивает их расчет с меньшей погрешностью.

В табл. 1 представлены данные для критического индекса  $\alpha$ , полученные при аппроксимации теплоемкости в различных температурных интервалах на основе выражения (5). Как видно из таблицы, в интервале температур  $3 \times 10^{-3} \leq t \leq 5 \times 10^{-1}$  все индексы имеют отрицательный знак, характерный для модели Гейзенберга, и принимают значение из интервала  $-0.14$ – $-0.18$ . Следует обратить внимание на то, что с уменьшением  $t_{\max}$   $\alpha$  начинает расти, приближаясь к нулю, и затем принимает положительные значения. Это свидетельствует об изменении характера критического поведения от гейзенберговского к изинговскому.

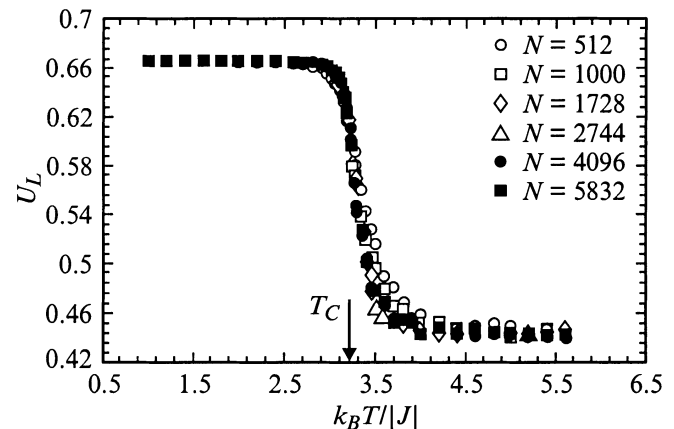
Теоретическое значение температуры кроссовера  $t_{cr}$  можно рассчитать по формуле  $t_{cr} = (D_A / |J|)^{1/f}$  [23], где  $f = 1.25$  при кроссовере от  $n = 3$  к  $n = 1$  ( $n$  — число компонент параметра порядка) и составляет для наших данных  $t_{cr} = 8.31 \times 10^{-4}$ . Из данных, представленных в табл. 1, следует, что в рассматриваемых системах кроссоверная область имеет достаточно большую ширину. Аналогичные особенности наблюдаются в поведении теплоемкости для модели Г2. Значения индекса  $\alpha$ , определенные таким образом, в пределах погрешности для модели Г1 и Г2 совпадают.

Для сравнения представим теоретические значения индексов  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для трехмерных систем: модель Изинга ( $n = 1$ ) —  $\alpha = 0.108$ ,  $\beta = 0.326$ ;  $\gamma = 1.24$  [3–4]; модель Гейзенберга ( $n = 3$ ) —  $\alpha = -0.126$ ,  $\beta = 0.368$ ;  $\gamma = 1.39$  [3–4]; модель с изотропными диполь-дипольными взаимодействиями —  $\alpha = -0.135$ ;  $\beta = 0.381$ ;  $\gamma = 1.37$  [23, 25 и ссылки в них].

Влияние дипольных сил в некоторой мере проявилось в значениях критического индекса восприимчивости  $\gamma$ . Для расчета критических индексов  $\gamma$  и  $\gamma'$  использовалась простая степенная зависимость.

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

Значения индексов  $\gamma$  и  $\gamma'$ , полученные для моделей Г1 и Г2, представлены в табл. 2. Восприимчивость является

**Рис. 4.** Зависимость кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры для модели Г1.

**Таблица 2.** Эффективные значения критического индекса восприимчивости  $\gamma$  (и  $\gamma'$ ) для моделей гадолиния Г1 ( $D_d = 0$ ) и Г2 ( $D_d \neq 0$ ),  $0.95 \times 10^{-3} \leq t \leq 7 \times 10^{-1}$

N	$D_d = 0$		$D_d \neq 0$	
	$\gamma'$	$\gamma$	$\gamma'$	$\gamma$
512	1.13(3)	1.29	1.11(2)	1.17
1000	1.14	1.24	1.11	1.18
1728	1.15	1.28	1.12	1.13
2744	1.14	1.23	1.13	1.14
4096	1.18	1.28	1.15	1.14
5832	1.19	1.27	1.14	1.13

**Таблица 3.** Эффективные значения критического индекса намагниченности  $\beta$  для моделей гадолиния Г1 ( $D_d = 0$ ) и Г2 ( $D_d \neq 0$ ),  $0.95 \times 10^{-3} \leq t \leq 6 \times 10^{-1}$

N	$D_d = 0$		$D_d \neq 0$	
	$a_m = 0$	$a_m \neq 0$	$a_m = 0$	$a_m \neq 0$
512	0.30(2)	0.32	0.32	0.32
1000	0.31	0.33	0.33	0.34
1728	0.32	0.33	0.33	0.34
2744	0.32	0.34	0.34	0.36
4096	0.33	0.34	0.34	0.35
5832	0.33	0.34	0.34	0.36

сильно флуктуирующей величиной, и традиционные способы обработки МК данных не позволяют однозначно определить характер критического поведения. Но данные, представленные в табл. 2, довольно убедительно свидетельствуют о тенденции изменения индексов восприимчивости при переходе от модели Г1 к модели Г2. Отметим, что в модели Г2 наблюдается хорошо заметная тенденция к уменьшению абсолютных значений индекса  $\gamma$  по сравнению со значениями, полученными для модели Г1. В то же время для индекса  $\gamma'$  эти особенности проявляются значительно меньше.

Аппроксимацию критического поведения намагниченности выполняли, используя выражение

$$m = B|t|^\beta(1 + a_m|t|^x), \quad (7)$$

где  $B$  и  $a_m$  — критическая амплитуда и амплитуда коррекции к скейлингу соответственно. Данные МК — экспериментов обрабатывались как с учетом коррекции к скейлингу ( $a_m \neq 0$ ), так и без учета коррекции ( $a_m = 0$ ). Результаты расчета критического индекса  $\beta$  для моделей Г1 и Г2 представлены в табл. 3.

Расчеты проводились в том же температурном интервале, что и для восприимчивости. Для модели Г1 индекс  $\beta$  при обработке данных без учета коррекции к скейлингу ( $a_m = 0$ ) и с учетом коррекции ( $a_m \neq 0$ ) принимает значения в интервале 0.31–0.34. По данным трудно обнаружить влияние учета коррекции к скейлингу, так как данные для ( $a_m \neq 0$ ) и ( $a_m = 0$ ) в пределах погрешности

совпадают. Учет дипольных взаимодействий в модели Г2 приводит к небольшому смещению значений  $\beta$  в сторону увеличения.

Отметим, что значения критических индексов  $\gamma$  и  $\beta$  не дают возможности однозначно определить характер критического поведения рассматриваемых моделей. Мы связываем эти особенности с тем, что восприимчивость является сильно флуктуирующей величиной, а намагниченность имеет высокотемпературные ”хвосты”. Поэтому традиционные способы обработки этих величин приводят к серьезным трудностям. Как будет показано далее, анализ этих же данных на основе другого подхода дает более ясную картину критического поведения.

#### 4. Конечно-размерный скейлинг

Основные положения теории конечно-размерного скейлинга (КРС) сводятся к тому, чтобы учесть влияние конечных ( $L \ll \infty$ ) размеров систем, изучаемых методами МК, в последнее время КРС широко используется [5,9,28,29]. В соответствии с этой теорией, свободная энергия достаточно большой системы с периодическими граничными условиями при температуре близкой к критической  $T_c$  масштабируется следующим образом:

$$F(T, L) = L^{-d}F(tL^{1/\nu}), \quad (8)$$

где  $d$  — размерность пространства,  $T_c = T_c(L = \infty)$ ,  $\nu$  — статистический критический индекс корреляционной длины бесконечно большой системы ( $L = \infty$ ). Выражение (8) приводит к аналогичным зависимостям для теплоемкости, намагниченности и восприимчивости, приходящихся на один спин

$$C(TL) \approx L^{\alpha/\nu}C_0(tL^{1/\nu}), \quad (9)$$

$$m(TL) \approx L^{-\beta/\nu}m_0(tL^{1/\nu}), \quad (10)$$

$$\chi(TL) \approx L^{\gamma/\nu}\chi(tL^{1/\nu}). \quad (11)$$

Уравнения (9)–(11) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечно больших систем при  $t \ll 1$  и  $L \rightarrow \infty$ .

Из этой теории следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T = T_c$  и достаточно больших  $L$  намагниченность и восприимчивость удовлетворяют следующим выражениям:

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (12)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}. \quad (13)$$

Анализ наших данных, выполненный на основе соотношений (12)–(13), также позволил определить значения  $\beta$  и  $\gamma$ . Для этого в двойном логарифмическом масштабе строились зависимости  $m$  и  $\chi$  от линейных размеров решетки  $L$ . Полученные таким образом величины для модели Г1 равны  $\beta/\nu = 0.501$  и  $\gamma/\nu = 1.987$ . Если учесть, что исходный гамильтониан гейзенберговский и принять  $\nu = 0.706$  [3–4], то  $\beta = 0.35(2)$  и

$\gamma = 1.40(2)$ . Отметим, что эти значения хорошо согласуются с теоретически рассчитанными для модели Гейзенберга ( $\beta = 0.368$ ,  $\gamma = 1.39$  [3–4]). Для модели II  $\beta/\nu = 0.569$  и  $\gamma/\nu = 1.917$ . Поскольку эта модель учитывает наряду с обменными взаимодействиями и диполь-дипольные, определим индексы как при  $\nu = 0.706$  (модель Гейзенберга), так и при  $\nu = 0.69$  (дипольная модель [25]). Таким образом,  $\beta = 0.40(2)$ ,  $\gamma = 1.35(2)$  при  $\nu = 0.706$  и  $\beta = 0.39(2)$ ,  $\gamma = 1.33(2)$  при  $\nu = 0.69$ . Обращает на себя внимание тот факт, что значения  $\beta$  и  $\gamma$  для этой модели сместились в сторону значений, которые характерны для трехмерных дипольных моделей ( $\beta = 0.38$ ,  $\gamma = 1.37$  [25]). Абсолютные значения, полученные при  $\nu = 0.706$ , в пределах погрешности совпадают с ними. Следует отметить и то, что при замене  $\nu = 0.706$  на  $\nu = 0.692$  значение индекса  $\gamma$  смещается в сторону уменьшения, что характерно для перехода от критического поведения трехмерной модели Гейзенберга с изотропными короткодействующими силами к трехмерной дипольной модели.

Обычно для теплоемкости на практике при масштабировании используются максимальные значения  $C_{\max}$  и следующее выражение [5,28,30]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (14)$$

где  $a$  — некоторый коэффициент. Аппроксимация данных, выполненная на основе выражения (14), дает значение критического индекса  $\alpha = -0.15(2)$  для модели Г1 и  $\alpha = 0.17(2)$  для модели Г2 при  $\nu = 0.706$ . Значения  $\alpha$ , пересчитанные для модели Г2 при  $\nu = 0.69$  (дипольная модель), в погрешности совпадают со значениями, полученными при  $\nu = 0.706$ . Эти результаты также хорошо согласуются с теоретическими данными, полученными для модели Гейзенберга, а также с данными анализа результатов МК-расчетов на основе традиционных степенных функций.

Наши результаты, полученные методом МК при исследовании моделей реального ферромагнитного гадолиния, свидетельствуют о том, что Г1 проявляет гейзенберговский характер критического поведения. Критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , определенные аппроксимацией данных степенными функциями и из соотношений теории КРС, хорошо согласуются как между собой, так и теоретическими значениями, а также с большинством данных, полученных в лабораторных экспериментах для гадолиния [18,23–25].

Индексы  $\beta$  и  $\gamma$ , полученные традиционным способом из выражений (6) и (7), имеют характерную для МК-данных специфику по ним трудно судить о характере критического поведения. В то же время результаты, полученные для  $\beta$  и  $\gamma$  из обработки тех же данных, в соответствии с теорией КРС однозначно устанавливают принадлежность модели Г1 к гейзенберговскому классу универсальности с индексами  $\alpha = -0.15(2)$ ,  $\beta = 0.35(2)$ ,  $\gamma = 1.40(2)$ . Сравнение критических параметров, рассчитанных для моделей Г1 и Г2, показывает, что учет изотропных диполь-дипольных взаи-

модействий в модели Г2 приводит к смещению значений критических параметров, которое характерно для перехода от модели Гейзенберга к дипольной модели. Обратим внимание и на то, что учитываемые в модели Г2 изотропные диполь-дипольные взаимодействия являются лишь слабым возмущающим фактором на фоне сильных обменных взаимодействий. Исследования влияния таких сил на характер критического поведения при одновременном учете другого слабого возмущающего фактора — одноосной анизотропии — ранее не проводилось, и разрешающие способности метода МК в этом плане были не известны. Поэтому все эксперименты и обработка данных производились при строгом соблюдении единой методики. Те особенности, которые проявились в модели Г2, свидетельствуют о высокой разрешающей способности метода МК.

Отметим, что, хотя результаты обработки данных на основе теории КРС лучше согласуются с теоретическими и экспериментальными результатами, анализ этих же данных путем их аппроксимации степенными функциями позволяет получить обширную дополнительную информацию. По нашему мнению, для составления наиболее полной картины критического поведения такого рода систем необходим анализ результатов МК-расчетов обоими способами.

## Список литературы

- [1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
- [2] Ш. Ма. Современная теория критических явлений. Мир, М. (1980).
- [3] J.J.C. Le Guillou, J.J. Zinn-Justin. Phys. Lett. **46**, L 137 (1985).
- [4] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov. Phys. Rev. **E51**, 1894 (1995).
- [5] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.А. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
- [6] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, Х.К. Алиев, В.А. Мутайламов. ЖЭТФ **117**, 3, 559 (2000).
- [7] Г.А. Мартынов. УФН **169**, 600 (1999).
- [8] К. Биндер. Методы Монте-Карло в статистической физике. Мир, М. (1982).
- [9] К. Биндер, Х.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995).
- [10] D.P. Landau. Physica **A205**, 41 (1994).
- [11] Ch. Holm, W. Janke. Phys. Rev. **B48**, 936 (1993).
- [12] К.П. Белов, М.А. Беляничикова, Р.З. Левитин, С.А. Никитин. Редкоземельные ферро- и антиферромагнетики. Наука, М. (1965).
- [13] В.М. Кучин, В.А. Соменко, С.Ш. Шильштейн, Ю.Б. Патрицкий. ЖЭТФ **55**, 4 (10), 1241 (1968).
- [14] R.H. Child. Phys. Rev. **B18**, 1247 (1978).
- [15] D.A. Doleisi, S.A. Swenson. Phys. Rev. **B24**, 6326 (1981).
- [16] E.A. Lewis. Phys. Rev. **B1**, 4368 (1970).
- [17] D.S. Simons, M.B. Salamon. Phys. Rev. **B10**, 4680 (1974).
- [18] G. Bednarz, D.J.W. Geldart, Mary Anne White. Phys. Rev. **B47**, 14 247 (1993-1).
- [19] G.H.J. Wentenaar, S.L. Campbell, D.N. Chaplin. Phys. Rev. **B29**, 1419 (1984).

- [20] P. Molho, J.L. Portosceill. *J. Magn. Magn. Mater.* **31–34**, 1023 (1983).
- [21] A.J. Saleh, N.H. Saunders. *J. Magn. Magn. Mater.* **29**, 197 (1982).
- [22] P. Heller. *Rep. Prog. Phys.* **30**, 731 (1967).
- [23] Х.А. Алиев, И.К. Камиллов, О.М. Омаров. *ЖЭТФ* **94**, 153 (1988).
- [24] A.R. Chowdhury, G.S. Collins, Ch. Hohenemser. *Phys. Rev.* **B33**, 6231 (1986).
- [25] И.К. Камиллов, Х.А. Алиев. Статистические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах. Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).
- [26] С.В. Вонсовский. *Магнетизм*. Наука, М. (1971).
- [27] К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, М. (1979).
- [28] А.К. Муртазаев. *Физика низких температур* **25**, 469 (1999).
- [29] A.K. Murtazaev, I.K. Kamilov, Kh.K. Aliev. *J. Magn. Magn. Mater.* **204**, 1–2, 151 (1999).
- [30] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).