

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНИЗОТРОПНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА MnF_2

Магомедов М.А.

Институт физики ДНЦ РАН, Россия, 367003, г.Махачкала, ул. М.Ярагского, 94.
magomedov_ma@iwt.ru

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию моделей магнитных материалов методами вычислительной физики – методами Монте-Карло (МК). Связано это не только со стремительным ростом вычислительных мощностей компьютеров, но и с разработкой новых высокоэффективных алгоритмов, таких как кластерные алгоритмы. К настоящему времени уже имеется возможность получить методами МК высокоточные данные о характере критического поведения магнетиков, которые не только не уступают по точности данным других методов, но и зачастую превосходят их.

Тем не менее, исследование фазовых переходов и критических явлений методом МК проведены в основном на классических моделях, в которых не учитываются слабые релятивистские взаимодействия, такие как одноосная анизотропия, диполь-дипольные взаимодействия и т.д. В то же время большое количество экспериментальных работ, проведенных на материалах такого рода, показывают, что эти силы могут оказывать значительное влияние на характер критического поведения.

Примерами таких материалов являются: EuO , EuS , $RbMnF_3$, FeF_2 и MnF_2 . Все эти материалы имеют величину спина $S \geq 2$ и могут быть хорошо описаны классической моделью Гейзенберга с обменным взаимодействием между ближайшими соседями, причем обменное взаимодействие в некоторых материалах носит конкурирующий характер. Величина анизотропии в EuO , EuS и $RbMnF_3$ незначительна, 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.

В настоящей работе нами проведены высокоточные исследования критических свойств модели антиферромагнетика MnF_2 . При построении модели MnF_2 учитывались все кристаллографические, магнитные и другие особенности этого материала.

Для исследования модели MnF_2 было выполнено обобщение высокоэффективного одно-кластерного алгоритм Вульфа метода МК. Полученные численные данные свидетельствуют об определенном характере влияния одноосной анизотропии на критическое поведение этой системы. Значения критических индексов, рассчитанных на основе теории конечно-размерного скейлинга, соответствуют модели Изинга. Численные данные, полученные нами, находятся в хорошем согласии с данными лабораторных исследований реальных макрообразцов MnF_2 . Следовательно, предложенная нами модель адекватно описывает свойства реальных образцов материала, а также свидетельствует о высокой точности и эффективности использованного метода.