ЖЭТФ, 2001, том 120, вып. 6 (12), стр. 1535–1543

КЛАСТЕРНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО, КОНЕЧНО-РАЗМЕРНЫЙ СКЕЙЛИНГ И КРИТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ СЛОЖНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ

А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов*

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Республика Дагестан, Россия

Поступила в редакцию 14 июня 2001 г.

Впервые с помощью кластерных алгоритмов метода Монте-Карло исследованы критические свойства микроскопических моделей реального ферромагнитного гадолиния. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны критические индексы теплоемкости α, намагниченности β, восприимчивости γ и индекс Фишера η. Установлены особенности, характер и степень влияния двух типов слабых релятивистских взаимодействий на критические свойства моделей гадолиния при их одновременном учете. Показано, что кластерные алгоритмы метода Монте-Карло являются высокоэффективным инструментом исследования критических свойств сложных моделей с кроссоверами.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная теория фазовых переходов и критических явлений в основном базируется на идеях, заключенных в гипотезах скейлинга, универсальности и теории ренормгруппы [1, 2]. На их основе было получено большинство важнейших результатов современной теории фазовых переходов и критических явлений, установлены основные закономерности, наблюдающиеся в критической области, получены соотношения между критическими индексами и критическими амплитудами, построены уравнения состояния, рассчитаны значения критических индексов и амплитуд. Численные значения, полученные на основе теории ренормгруппы и ε-разложения, считаются наиболее точными и надежными из всех приближенных результатов, имеющихся на сегодняшний день [3–6]. Современный этап исследования фазовых переходов и критических явлений характеризуется изучением более сложных и реалистичных моделей [7–11]. А подход, лежащий в основе теории ренормгруппы, сталкивается с большими трудностями при изучении моделей с кроссоверами и не является чисто микроскопическим [6–12].

Эти и ряд других причин привели к тому, что фазовые переходы и критические явления в настоящее время интенсивно исследуются методами Монте-Карло (МК) [6–11, 13–16]. Количественное исследование непосредственно самой критической области методами МК стало возможным только в самые последние годы. На сегодняшний день методом МК получены результаты, которые по точности не уступают лучшим данным других методов, а иногда и превосходят их [6, 13–16].

Естественно, что подобные успехи не могли быть достигнуты только лишь путем увеличения вычислительных мощностей современных компьютеров без использования некоторых дополнительных идей и методов. Среди последних, в первую очередь, необходимо отметить, с одной стороны, разработку мощных кластерных алгоритмов метода МК [17–20], с другой, — использование идей, заложенных в теории конечно-размерного скейлинга (для расчета критических параметров) [6, 21, 22], и гистограммных методов анализа МК-данных [14].

До сих пор в основном эти алгоритмы и идеи опробовались на простейших моделях первого приближения (классические модели Изинга и Гейзенберга и т. д.). Значительно меньшее внимание уделялось более сложным и реалистичным моделям, в которых возможны кроссоверные переходы.

*E-mail: kamilov@datacom.ru

Другой важный аспект исследования моделей сложных реальных магнитных материалов методами МК состоит в том, что появляется возможность сопоставления результатов численного эксперимента не только с теоретическими, но и с экспериментальными данными. Это особенно важно, когда результаты лабораторных исследований критических явлений противоречивы и не позволяют однозначно ответить на некоторые важные вопросы.

Нами предложены микроскопические модели реального ферромагнитного гадолиния. Эти модели исследованы кластерными алгоритмами метода МК, и на основе теории конечно-размерного скейлинга выполнен расчет основных статистических критических индексов.

Интерес к моделям гадолиния обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, на характер критического поведения гадолиния могут оказать существенное влияние слабые релятивистские взаимодействия, такие как анизотропия и диполь-дипольные взаимодействия [5, 23–26]. Ранее эффективность кластерных алгоритмов метода МК при исследовании моделей, в которых наряду с сильными обменными взаимодействиями учитываются и слабые релятивистские взаимодействия, вследствие чего могут наблюдаться кроссоверные явления, никем не изучалась.

Во-вторых, в рассматриваемых моделях два типа слабых релятивистских взаимодействий учитываются одновременно на фоне сильных обменных взаимодействий и друг друга. Применимость и работоспособность теории конечно-размерного скейлинга при исследовании таких моделей, насколько нам известно, никем не проверялись [6].

В-третьих, чувствительность и разрешающие способности метода МК и возможности выявления влияния таких слабых факторов на критическое поведение практически не исследованы.

В-четвертых, редкоземельный металл гадолиний имеет удобную для лабораторных экспериментов температуру фазового перехода $T_c \approx 293$ К и достаточно хорошо изучен. Но данные лабораторных исследований критических свойств гадолиния не дают возможности составить полную и строгую картину критического поведения гадолиния [26, 27].

2. КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГАДОЛИНИЯ

Гадолиний — редкоземельный металл, имеющий плотноупакованную гексагональную структуру. В интервале температур 232 К$< T < T_c \approx 293$ К в нем реализуется простое ферромагнитное упорядочение. Магнитные и нейтронографические исследования показывают, что за анизотропию в гадолинии ответственны как одноионный, так и двухионный механизмы, а в парамагнитной фазе она обусловлена одноосной анизотропией ближнего магнитного порядка [22–25]. 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 приводят к изотропному обменному взаимодействию, что предполагает гейзенберговский характер критического поведения.

Экспериментальному исследованию статического критического поведения гадолиния посвящено большое число работ [25–35]. Из измерений теплового расширения [25, 28], теплоемкости [27, 29, 30], магнитных свойств [26, 31–34], мессбауэровских исследований [35], проведенных на различных моно- и поликристаллических образцах, был определен набор статических критических индексов α, β, γ, δ. В работах [5, 26, 35] приведены таблицы, в которых собраны значения этих индексов. Сравнение этих данных с теоретически предсказанными для трехмерных моделей Изинга и Гейзенберга показывает их противоречивость. Из значений критических индексов теплоемкости α, теплового расширения a и самопроизвольной намагниченности β следует, что гадолиний является либо гейзенберговским, либо изотропным дипольным магнетиком. В то же время значения критического индекса γ близки к характерным для модели Изинга. Индекс δ не соответствует предсказаниям ни микроскопических теорий, ни теории молекулярного поля.

Анализ существующих экспериментальных данных показывает, что эти несоответствия могут быть обусловлены следующими обстоятельствами.

1. Причинами, связанными с методикой определения тех или иных индексов [5, 26]. В большинстве работ критические индексы β, γ, δ 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 индексы β, γ и δ, но в отдельности их значения могут и не соответствовать истинному асимптотическому критическому поведению.

2. В реальных кристаллах всегда есть ряд добавочных взаимодействий, возмущающих исходное критическое поведение. Например, присутствие в гейзенберговских магнетиках изотропных дипольных взаимодействий приводит к зависимости индекса γ от приведенной температуры [26].

3. Эксперименты, проведенные на разных образцах гадолиния, показали, что существенное влияние оказывают дефекты, которые могут изменить характер критического поведения [27].

4. Как оказалось, на критические свойства гадолиния, в частности, на ширину и высоту пика теплоемкости, влияет техника приготовления образца [27].

5. Теоретические оценки индексов получены для статических моделей, в которых 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 значений.

Отметим, что тщательные экспериментальные исследования статических критических свойств гадолиния выполнены в [26], где определены значения индексов β, γ, δ. Особенности поведения теплоемкости изучены в [27]. Данные этой работы показывают, что критическое поведение теплоемкости весьма чувствительно к способу приготовления образца, к его чистоте и химическому составу.

3. МОДЕЛИ

При построении моделей гадолиния необходимо иметь в виду следующие особенности этого материала:

а) электронная плотность распределена сферически-симметрично, орбитальный момент отсутствует;

б) энергия магнитной кристаллографической анизотропии значительно меньше, чем у других редкоземельных элементов;

в) в гадолинии в критической области существенную роль могут играть изотропные диполь-дипольные взаимодействия.

С учетом этих особенностей гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - \frac{1}{2} D_a \sum_i (\mathbf{S}_i^z)^2 - - D_d \sum_i (\langle \mathbf{m} \rangle \cdot \mathbf{S}_i), \quad (1)$$

где $\mathbf{m}$ — намагниченность, $\mathbf{S}$ — классический трехмерный спин, $|\mathbf{S}_i| = 1$, первый член учитывает обменное взаимодействие каждого из ионов Gd^{3+} со всеми ближайшими соседями ($J > 0$), второй — одноионную анизотропию (D_a), третий — изотропное диполь-дипольное взаимодействие (D_d). Согласно данным, полученным на основе теории молекулярного поля [23, 26, 36, 37], параметры анизотропии D_a и изотропных дипольных сил D_d имеют значения $D_a/J = 1.41 \cdot 10^{-4}$ и $D_d/J = 1.35 \cdot 10^{-3}$. Отметим, что все физические величины представлены в безразмерных единицах.

Расчеты проводились для образцов кубической формы размерами $L \times L \times L$ ($L = 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26, 28, 30, 32$) с периодическими граничными условиями. При формировании моделируемых систем учитывались все магнитные и кристаллографические особенности реального гадолиния. Для выяснения степени влияния дипольных сил на характер критического поведения рассматривались две модели гадолиния: модель Г1, учитывающая обменное взаимодействие с ближайшими соседями и одноосную анизотропию, и модель Г2 с дополнительным учетом изотропного диполь-дипольного взаимодействия. Исследование влияния слабых релятивистских взаимодействий различного типа на фоне сильных обменных взаимодействий и одновременно друг друга на характер критического поведения кластерными алгоритмами метода МК ранее не проводилось, возможности и особенности кластерных алгоритмов применительно к сложным моделям с кроссоверами не изучались.

4. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Кластерные алгоритмы метода МК [17–28] оказались весьма эффективным инструментом при исследовании критических явлений в различных системах и моделях [6, 15, 16, 38, 39]. Критические параметры, рассчитанные на основе данных, полученных с помощью кластерных алгоритмов, обладают высокой точностью и надежностью [6]. Из всех вариантов кластерных алгоритмов метода МК наиболее эффективным является алгоритм Вульфа [17, 18]. Этот алгоритм был использован нами для исследования моделей Г1 и Г2 в следующем виде.

1. Случайным образом задается направление единичного вектора $\mathbf{r}$.

2. Случайным образом выбирается один из спинов решетки $\mathbf{S}_i \in A$, где A — совокупность всех уз-

лов решетки (в дальнейшем, следуя работе [38], будем называть этот спин центральным).

3. Задается новое направление спина: $R\mathbf{S}_i \to \mathbf{S}'_i$, $R\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_i - 2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}$. Фактически операция R заключается в зеркальном отражении спина через плоскость, перпендикулярную вектору $\mathbf{r}$.

4. Посещаются все ближайшие соседи j выбранного i-го спина. Связь $\langle ij \rangle$ активируется с вероятностью

$$P = 1 - \exp\left\{\min\left[0, 2J\beta(\mathbf{r}\cdot\mathbf{S}_i)(\mathbf{r}\cdot\mathbf{S}_i)\right]\right\}, \quad \beta = 1/k_BT. \tag{2}$$

5. Если связь $\langle ij \rangle$ активируется, то спин в узле j меняет направление, $R\mathbf{S}_j \to \mathbf{S}'_j$, в этом случае спин j включается в кластер.

6. После проверки всех ближайших соседей спина i первый перевернутый спин j становится «центральным» и начинается процесс установления связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты границы системы.

Таким образом, совокупность всех перевернутых спинов образует «кластер». Один и тот же спин может быть перевернут только один раз, тогда как проверен несколько раз.

Отметим, что активацию связи можно представить в виде

$$P = 1 - \exp\left\{\min[0, dU]\right\},$$

где $dU = dU_j - dU_i$, U — внутренняя энергия.

Начальные конфигурации задавались таким образом, что все спины упорядочены вдоль оси z. Для вывода системы в состояние равновесия отсекалось 10^4 МК-шагов/спин (1 МК-шаг/спин — это один переворот кластера), что превосходило в двадцать и более раз неравновесный участок даже вблизи от критической точки. Усреднение термодинамических величин проводилось по марковской цепи длиной до $3 \cdot 10^6$ МК-шагов/спин. Обратим внимание на то, что при $T \approx T_c$ с ростом размеров системы L растет средний размер переворачиваемого кластера, и это естественно. В то же время относительный размер переворачиваемого кластера с ростом L плавно уменьшается. Например, для наших моделей при $L = 8$ ($N = 512$ спинов) кластер содержит в среднем 51 спин, что составляет около 10 %. Для системы с $L = 32$ ($N = 32768$ спинов) кластер содержит в среднем 796 спинов, что составляет всего около 2.5 %. Отметим, что при $T \ll T_c$ относительный средний размер кластера одинаков для всех систем при фиксированной температуре.

5. КОНЕЧНО-РАЗМЕРНЫЙ СКЕЙЛИНГ

Теория конечно-размерного скейлинга, предложенная Фердинандом и Фишером [21, 40], призвана учесть влияние конечных размеров системы на критические свойства. Идеи, заложенные в этой теории, позволяют экстраполировать МК-результаты, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу $N = L^3 \to \infty$ и широко используются [6, 8, 9, 13–16, 39]. Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с периодическими граничными условиями при температуре T, близкой к критической температуре T_c бесконечной системы, может быть представлена в виде

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \tag{3}$$

где $t = |T - T_c|/T_c$, $T_c = T_c(L = \infty)$ и ν — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$). При этом смещение «эффективной температуры перехода» с изменением размеров системы происходит в соответствии с выражением

$$\frac{k_BT_c(L)}{J} = \frac{k_BT_c}{J} + aL^{-1/\nu}, \tag{4}$$

a — некоторая константа. Выражение (3) ведет к аналогичным зависимостям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящейся на один спин:

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \tag{5}$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \tag{6}$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \tag{7}$$

где α, β и γ — статические критические индексы для системы с $L = \infty$, связанные соотношением гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [1].

Уравнения (5)–(7) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечных систем при $t \ll 1$ и $L \to \infty$. Справедливость применения теории конечно-размерного скейлинга к простым, хорошо известным моделям была показана в целом ряде работ (см. обзор [6]). Насколько хорошо применима теория конечно-размерного скейлинга к моделям с кроссоверами, проверено лишь на весьма ограниченном числе моделей [6, 8–10]. Исследование моделей, в которых возможны несколько кроссоверных переходов, кластерными алгоритмами метода МК на основе теории конечно-размерного скейлинга, насколько нам известно, вообще никем еще не проводилось.

Обратим внимание еще на один момент. При расчете критических индексов восприимчивости (γ) и

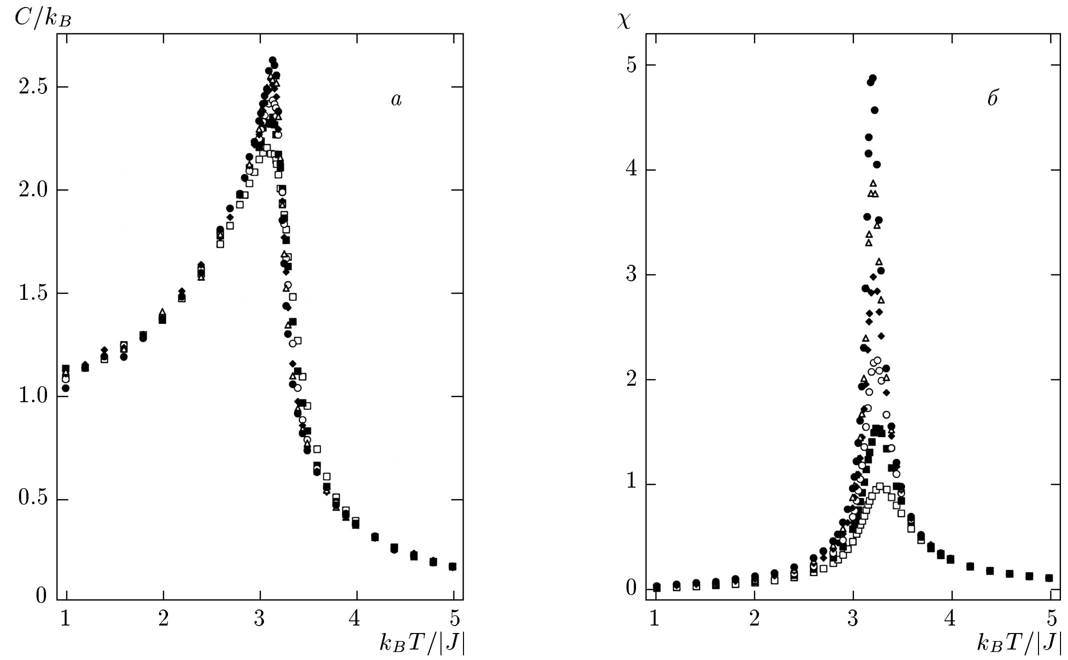

Рис. 1. Зависимости теплоемкости (a) и восприимчивости ($б$) от температуры для модели Г2 для $N = 512$ (□), 1000 (■), 1728 (○), 2744 (♦), 4096 (△), 5832 (●)

намагниченности (β) используются следующие выражения:

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \tag{8}$$

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \tag{9}$$

которые получаются из (6) и (7) при $T = T_c$. Эти соотношения позволяют легко определить γ/ν и β/ν. В то же время данные для теплоемкости по этой схеме описать не удается. Поэтому при определении индекса α на практике для масштабирования теплоемкости используется выражение [6, 8–10]

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \tag{10}$$

где a — некоторый коэффициент.

Выражение (4) также малопригодно для использования на практике из-за невысокой точности определения T_c на его основе. Значительно более точным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [41]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m_2 \rangle_L^2}, \tag{11}$$

где m — намагниченность системы с линейными размерами L. Этот метод позволяет определить T_c с большой точностью. Если в системе происходит фазовый переход первого рода, то вместо m в (11) фигурирует энергия системы E [6]. Ниже на наших моделях мы продемонстрируем высокую эффективность этого метода.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения

$$C = (NK^2)\left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2\right), \tag{12}$$

$$\chi = (NK)\left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2\right), \tag{13}$$

где $K = |J|/k_BT$.

На рис. 1 представлены зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для более сложной из наших моделей — модели Г2. Здесь и далее погрешность данных не превышает размеры использованных символов на рисунках. Отметим хорошо выраженные максимумы для систем всех размеров, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Как видно, ожидаемой из выражения (4) зависимости T_c от L для наших данных не наблюдается. Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами пара-

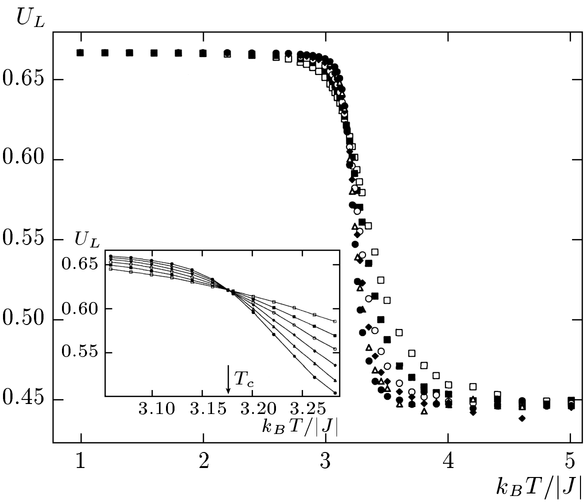

Рис. 2. Зависимость кумулянта U_L от температуры для модели Г2. Обозначения те же, что на рис. 1

метров. Поскольку на рис. 1 представлены данные для нижней части исследованного спектра значений L, для более высоких значений L наши результаты обладают не меньшей точностью и надежностью.

Для определения критических параметров на основе теории конечно-размерного скейлинга, очевидно, в первую очередь необходимо определить критическую температуру T_c, для чего использовался метод кумулянтов Биндера. Согласно теории конечно-размерного скейлинга, все кумулянты U_L, рассчитанные по формуле (11), для систем с разными размерами L пересекаются в точке T_c. На рис. 2 показана зависимость U_L от температуры для модели Г2. Вставка на этом рисунке демонстрирует, насколько точно можно определить критическую температуру. Аналогичные расчеты были выполнены и для модели Г1. Качественно все особенности, характерные для модели Г2 и представленные на рис. 1, 2, повторяются и для модели Г1.

Анализ данных для восприимчивости и намагниченности, выполненный на основе соотношений (8), (9), позволил определить значения индексов β и γ. Для этого в двойном логарифмическом масштабе строились зависимости m и χ от линейных размеров решетки L (рис. 3). Полученные таким образом зависимости для модели Г1 характеризуются величинами $\beta/\nu = 0.5081$ и $\gamma/\nu = 1.9716$. Предполагая, что гамильтониан (1) гейзенберговский, а $\nu = 0.706$ [3, 4], получаем $\beta = 0.359(1)$ и $\gamma = 1.392(1)$. Эти значения индексов хорошо согласуются с теоретическими данными, полученными для модели Гейзенберга, $\beta = 0.368$ и $\gamma = 1.390$ [3, 4].

Аналогичные зависимости для модели Г2 дают значения $\beta/\nu = 0.5066$ и $\gamma/\nu = 1.9233$; так как модель Г2 учитывает наряду с обменным взаимодействием и диполь-дипольные, имеет смысл определить индексы как при $\nu = 0.706$ (модель Гейзенберга), так и при $\nu = 0.692$ (трехмерная дипольная модель [5]). Таким образом, $\beta = 0.358(1)$, $\gamma = 1.358(1)$ при $\nu = 0.706$ и $\beta = 0.351(1)$, $\gamma = 1.331(1)$ при $\nu = 0.692$. Отметим, что значение γ для этой модели сместилось в сторону сближения с значением, которое соответствует трехмерной дипольной модели ($\gamma = 1.37$ [5]), в то же время величина β практически не изменилась. Эта особенность характерна для перехода от гейзенберговского критического поведения с изотропными короткодействующими силами к трехмерной дипольной модели.

Как мы уже отметили, при обработке данных по теплоемкости на практике используется выражение (10), а не (5). Из наших данных для теплоемкости видно, что зависимость $C(L)$ в двойном логарифмическом масштабе не является линейной (рис. 4). Аппроксимация данных, выполненная нелинейным методом наименьших квадратов на основе выражения (10), дает значение критического индекса $\alpha = -0.115(2)$ для модели Г1 и $\alpha = -0.120(2)$ для модели Г2. Значение α, пересчитанное для модели Г2 при $\nu = 0.692$ (дипольная модель) дает значение $\alpha = -0.118(2)$, что в пределах погрешности совпадает со значением, полученным при $\nu = 0.706$.

Иногда критический индекс γ определяют, используя вместо $\chi(T_c)$ значения χ_{max}. Определенные таким образом значения индекса γ для моделей Г1 и Г2 равны соответственно 1.379(1) и 1.366(1).

По нашим данным имеется возможность определить и значения критического индекса Фишера η. Используя связь между восприимчивостью χ и радиусом корреляции ξ [16],

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}, \tag{14}$$

а также соотношение между критическими индексами $\eta = 2 - \gamma/\nu$, получим

$$\ln(\chi/\xi^2) = C - \eta \ln \xi, \tag{15}$$

где C — некоторая константа.

Для систем с конечными размерами $\xi = L$ при $T = T_c$, таким образом, имеем

$$\ln(\chi/L^2) = C - \eta \ln L. \tag{16}$$

Зависимость χ/L^2 от L для модели Г1 представлена на рис. 5. Значение индекса Фишера η по этим данным равно $\eta = 0.045(5)$. Как видно из рис. 5,

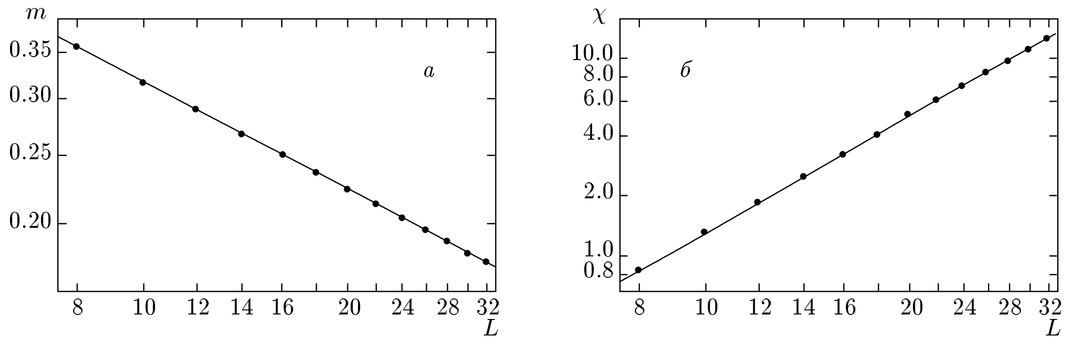

Рис. 3. Зависимости намагниченности (a) и восприимчивости ($б$) от линейных размеров системы для модели Г1 при $T = T_c$: a — $\beta/\nu = 0.50808$, $\beta = 0.35870$; $б$ — $\gamma/\nu = 1.97164$, $\gamma = 1.39198$

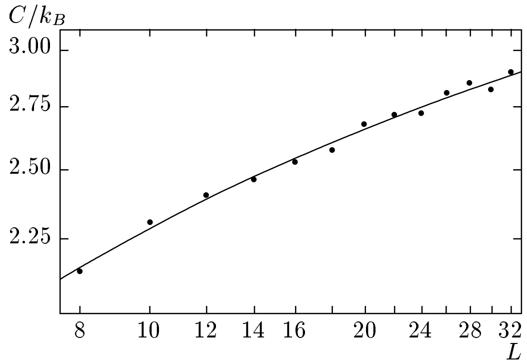

Рис. 4. Зависимость теплоемкости от линейных размеров системы для модели Г1 при $T = T_c$; $\alpha/\nu = -0.16347$, $\alpha = -0.11540$

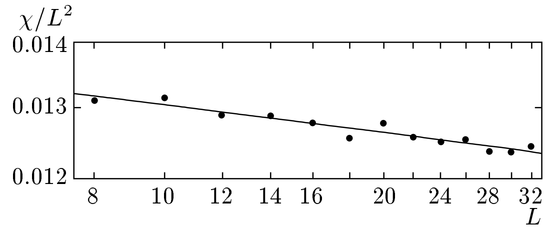

Рис. 5. Зависимость χ/L^2 от линейных размеров системы для модели Г1 при $T = T_c$; $\eta = 0.04514$

полученные данные не отклоняются от прямой при малых значениях L, что часто наблюдается в других работах [16]. Возможно, для радиуса корреляции ξ и восприимчивости χ асимптотический критический режим достигается уже при $L \geq 8$. Полученное нами значение η неплохо согласуется с данными, полученными как на основе теории поля, $\eta \approx 0.033$–0.038 [3, 4], так и методами МК, $\eta \approx 0.027$ [6, 16]. Для модели Г2 нами найдено значение $\eta = 0.048(5)$, что в пределах погрешности совпадает со значением для модели Г1.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наши данные, полученные на основе однокластерного алгоритма Вульфа метода Монте-Карло при исследовании сложных моделей реального гадолиния, свидетельствуют о высокой эффективности данного алгоритма. Использование этого алгоритма вблизи критической точки позволяет по крайней мере на порядок уменьшить времена счета по сравнению с классическим односпиновым алгоритмом Метрополиса при сохранении той же точности результатов. Это особенно важно при изучении сложных моделей, в которых кроссоверные эффекты обнаруживаются лишь при достижении значительной статистики и высокой точности результатов.

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 кластерными алгоритмами метода МК не проводились. Работоспособность, эффективность и разрешающая способность кластерных алгоритмов в выявлении таких факторов не были изучены. По этой причине и для сравнения результатов с данными, полученными с использованием классических алгоритмов, все эксперименты проводились при строгом соблюдении единой методики. Особенности, которые проявлялись при исследовании модели Г2, характеризуют и значительную разрешающую способность кластерных алгоритмов метода МК.

Основные статические критические индексы:

$$\alpha = -0.115(1), \quad \beta = 0.359(1),$$

$$\gamma = 1.392(1), \quad \eta = 0.045(5),$$

рассчитанные по данным метода МК на основе теории конечно-размерного скейлинга для модели Г1 в пределах погрешности совпадают с теоретически предсказанными значениями для трехмерной изотропной модели Гейзенберга с короткодействующими силами, а также с данными, полученными методами МК для этой модели.

Для модели Г2 получен следующий набор значений индексов:

$$\alpha = -0.120(1), \quad \beta = 0.368(1),$$

$$\gamma = 1.358(1), \quad \eta = 0.048(5).$$

Сравнение набора индексов моделей Г1 и Г2 показывает, что выходящие за рамки погрешностей изменения произошли в значении индекса γ: для модели Г2 значения γ сближаются с теоретически предсказанным для дипольной модели значением (в пределах погрешности совпадают с ним). Аналогичное смещение значения γ в сторону уменьшения наблюдается при смене характера критического поведения от гейзенберговского к дипольному.

Наши данные также свидетельствуют о возможности и допустимости использования теории конечно-размерного скейлинга при изучении сложных моделей с кроссоверами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 01-02-16103) и гранта Комиссии Российской академии наук по работе с молодежью.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. З. Паташинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982)

2. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).

3. J. J. C. Le Guillou and J. J. Zinn-Justin, Phys. Lett. **46**, L157 (1985).

4. S. A. Antonenko and A. I. Sokolov, Phys. Rev. E **51**, 1894 (1995).

5. И. К. Камилов, Х. К. Алиев, *Статические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах*, Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).

6. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).

7. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, Х. К. Алиев, В. А. Мутайламов, ЖЭТФ **117**, 559 (2000).

8. А. К. Муртазаев, ФНТ **25**, 469 (1999).

9. A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, and Kh. K. Aliev, J. Magn. Magn. Mat. **204**, 151 (1999).

10. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, К. Ш. Хизриев, ФТТ **43**, 659 (2001).

11. В. В. Прудников, С. В. Белим, Е. В. Осинцев, А. А. Федоренко, ЖЭТФ **114**, 972 (1998).

12. Г. А. Мартынов, УФН **169**, 600 (1999).

13. D. P. Landau, Physica A **205**, 41 (1994).

14. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).

15. K. Chen, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **48**, 3249 (1993).

16. Ch. Holm and W. Janke, Phys. Rev. B **48**, 936 (1993).

17. U. Wolf, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).

18. U. Wolf, Nucl. Phys. B **322**, 759 (1989).

19. A. M. Ferrenberg and R. N. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).

20. A. M. Ferrenberg and R. N. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63**, 1195 (1989).

21. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, Phys. Rev. E **185**, 832 (1969).

22. А. Л. Цескис, ЖЭТФ **106**, 1089 (1994).

23. К. П. Белов, М. А. Белянчикова, Р. З. Левитин, С. А. Никитин, *Редкоземельные ферро- и антиферромагнетики*, Наука, Москва (1965).

24. В. М. Кучин, В. А. Соменко, С. Ш. Шильштейн, Ю. Б. Патрикиев, ЖЭТФ **55**, 1241 (1968).

25. R. H. Child, Phys. Rev. B **18**, 1247 (1978).

26. Х. К. Алиев, И. К. Камилов, О. М. Омаров, ЖЭТФ **94**, 153 (1988).

27. C. Bednarz, D. J. W. Geldart, and Mary Anne White, Phys. Rev. B **47**, 14247 (1993).

28. D. A. Doleisi and S. A. Swenson, Phys. Rev. B **24**, 6326 (1981).

29. E. A. Lewis, Phys. Rev. B **1**, 4368 (1970).

30. D. S. Simons and M. B. Salamon, Phys. Rev. B **10**, 4680 (1974).

31. G. H. J. Wantenaar, S. L. Compbell, and D. N. Chaplin, Phys. Rev. B **29**, 1419 (1984).

32. P. Molho and J. L. Portosseill, J. Magn. Magn. Mat. **31–34**, 1023 (1983).

33. A. J. Saleh and N. H. Saunders, J. Magn. Magn. Mat. **29**, 197 (1982).

34. P. Heller, Rep. Prog. Phys. **30**, 731 (1967).

35. A. R. Chowdhury, C. S. Collins, and Ch. Hohenemser, Phys. Rev. B **33**, 6231 (1986).

36. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).

37. К. П. Белов, А. К. Звездин, А. М. Кадомцева, Р. З. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).

38. О. А. Васильев, Л. Н. Щур, ЖЭТФ **117**, 1110 (2000).

39. W. Janke and K. Nather, Phys. Rev. B **48**, 7419 (1993).

40. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).

41. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).