

# СТАТИЧЕСКОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ФРУСТРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ПЕРЕМЕННЫМ МЕЖСЛОЙНЫМ ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*А. К. Муртазаев<sup>ab\*</sup>, М. К. Рамазанов<sup>a\*\*</sup>, М. К. Бадиев<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> *Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук  
367003, Махачкала, Республика Дагестан, Россия*

<sup>b</sup> *Дагестанский государственный университет  
367025, Махачкала, Республика Дагестан, Россия*

Поступила в редакцию 7 июня 2007 г.

Различными вариантами алгоритмов метода Монте-Карло выполнены исследования критических свойств трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием в интервале значений межслойного  $J'$  и внутрислойного  $J$  обменных взаимодействий  $R = |J'/J| = 0.01-1.0$ . С помощью теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические магнитные и киральные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$ , а также индекс Фишера  $\eta$ . Показано, что трехмерная фрустрированная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке образует новый класс универсальности критического поведения. При этом класс универсальности критического поведения этой модели сохраняется для  $R > 0.05$ . Обнаружено, что при дальнейшем уменьшении величины  $R$  наблюдается кроссовер от трехмерного к двумерному критическому поведению.

PACS: 05.70.Fh, 75.40.Cx, 75.40.Mg

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в фрустрированных спиновых системах — одна из самых сложных и интересных задач статистической физики. Современная теория ФП и КЯ в основном базируется на идеях, заложенных в гипотезе скейлинга, универсальности и в теории ренормгруппы [1, 2]. Результаты, полученные при исследовании фрустрированных систем (ФС), а также спиновых систем с замороженным немагнитным беспорядком, показывают, что многие из этих результатов выходят далеко за рамки современной теории ФП и КЯ [3].

Успехи, достигнутые в последние годы, в понимании ФП и КЯ в ФС в значительной степени связаны с применением методов вычислительной физи-

ки. Это обусловлено тем, что большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования таких систем сталкивается с серьезными трудностями при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения [3, 4]. Это привело к тому, что ФП и КЯ в ФС в настоящее время интенсивно изучаются методами Монте-Карло (МК) [4–11]. Исследование непосредственно самой окрестности критической точки методами МК стало возможно только в последние годы. Результаты, полученные методами МК, на сегодня по точности не уступают данным других методов, а иногда и превосходят их [4, 9].

Подобные успехи достигнуты не только путем увеличения вычислительных мощностей современных компьютеров, но и с использованием дополнительных идей и методов. При исследовании ФС необходимо, в первую очередь, отметить разработку

\*E-mail: m\_akai@int.ru

\*\*E-mail: sheikh77@mail.ru

репличных алгоритмов метода МК [12] и использование идей, заложенных в теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [5, 13–19].

В настоящее время продолжают интенсивные исследования критического поведения фрустрированных спиновых систем [20–23]. Последние во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью ФС к различного рода возмущающим взаимодействиям [24, 25].

Нами методом МК исследованы критические свойства трехмерной (3D) фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием.

Интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, при изучении фрустрированных систем вопрос о существовании нового кирального класса универсальности на многих решетках, в частности, треугольных до сих пор является дискуссионным [5–8, 20].

Во-вторых, многие важные физические свойства ФС сильно зависят от геометрии решетки (от степени фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, и этот вопрос все еще недостаточно полно изучен.

В-третьих, первые попытки исследования этой модели предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода Монте-Карло не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

В-четвертых, в литературе не встречаются исследования зависимости критических свойств фрустрированных систем от величины межслойного обменного взаимодействия. Между тем, критические индексы, будучи высокочувствительными параметрами, могут служить индикаторами пространственного кроссовера от трехмерного к двумерному (и обратно) критическому поведению. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить закономерности изменения критического поведения ФС в зависимости от параметра межслойного обменного взаимодействия, и этот вопрос до сих пор остается открытым [6, 7].

Кроме того, результаты исследований, полученные в работах [5–8, 20] носят весьма противоречивый

характер, что требует проведения дополнительных более точных исследований этой модели.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Антиферромагнитная 3D-модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке является фрустрированной магнитной системой. Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде [6]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - J' \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

где  $\mathbf{S}_i$  — трехкомпонентный единичный вектор,  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J < 0$  и  $J' > 0$  — константы обменного взаимодействия. Суммирование проводится по ближайшим соседям. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует внутриплоскостное антиферромагнитное взаимодействие спинов, а второй — межплоскостное ферромагнитное [6]. Фрустрации в этой модели обусловлены геометрией решетки [6–8, 20].

Исследования магнитных и общетермодинамических свойств этой модели методом МК выполнены в работе [6]. Показано, что в такой системе наблюдается фазовый переход второго рода при  $T_N = 0.954$  (здесь и далее температура дана в единицах  $|J|/k_B$ ), и рассчитаны некоторые магнитные статические критические индексы. Прямой анализ данных МК-эксперимента и определение индексов через углы наклона зависимостей термодинамических параметров на графиках, построенных в логарифмическом масштабе, являются малоубедительным, особенно при той небольшой МК-статистике, представленной в этой работе.

В более поздних работах [7, 8, 20] приведены значения магнитных и киральных критических индексов  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\nu$ ,  $\nu_k$ ,  $\gamma$  и  $\gamma_k$ , но выбранный авторами способ использования конечно-размерного скейлинга для их расчета, на наш взгляд, не отличается высокой точностью.

Тем не менее, данные этих работ свидетельствуют об отличии критических параметров фрустрированной 3D-модели Гейзенберга от значений, характеризующих класс универсальности чистой модели Гейзенберга. Согласно представлениям современной теории ФП и КЯ, класс универсальности критического поведения зависит в основном от размерности пространства  $D$ ; числа степеней свободы параметра порядка  $n$ ; симметрии гамильтониана; радиуса характерного взаимодействия [1, 2]. В то же время, ряд

имеющихся результатов говорит о том, что класс универсальности ФС может зависеть не только от этих параметров. Об этом свидетельствуют и результаты, полученные методом МК на решетках разной геометрии [5–8, 20]. Отметим, что асимптотические значения критических параметров таких систем известны с недостаточной точностью.

С учетом всего этого в данной работе нами принята попытка по возможности с максимальной точностью, с соблюдением единой методики, с использованием надежной и проверенной схемы определить значения критических параметров фрустрированной антиферромагнитной 3D-модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке, а также их зависимость от величины межслойного обменного взаимодействия.

Фрустрированные спиновые системы являются довольно сложными объектами для исследования даже методами МК. Как известно, вблизи критической точки метод МК сталкивается с проблемой «критического замедления», а в ФС эта проблема становится еще более актуальной. Кроме того, для ФС характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, специально ориентированных на исследования ФС. Из них наиболее мощными и эффективными в исследовании КЯ в ФС оказались репличные алгоритмы метода МК [12].

Поэтому в данном исследовании нами использован как классический алгоритм Метрополиса [26], так и высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло [12]. Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде.

1. Одновременно моделируются две реплики с разными температурами  $T$  и  $T'$ .

2. После выполнения 100 МК-шагов/спин эти реплики обмениваются данными в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X \rightarrow X') = \begin{cases} 1, & \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \Delta > 0, \end{cases}$$

где  $\Delta = (T - T')(U - U')$ ,  $U$  и  $U'$  — внутренняя энергия соответственно первой и второй реплик.

Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными алгоритмами в том, что вероятность обмена *a priori* известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности — проце-

дура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по «температурному интервалу», которое, в свою очередь, стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы «застывания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией. Однако для повышения эффективности этого метода необходимо увеличение числа реплик, что требует серьезного роста компьютерных мощностей.

Расчеты проводились нами для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 9-30$ . Соотношение межслойного и внутрислойного обменов менялось в интервале  $R = |J'/J| = 0.01-1.0$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной  $4.0 \cdot 10^5$  МК-шагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной до  $10^6$  МК-шагов/спин.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались выражения [8, 27–29]

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

$$\chi = \begin{cases} (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2), & T < T_N, \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N, \end{cases} \quad (3)$$

$$\chi_k = \begin{cases} (NK) (\langle m_k^2 \rangle - \langle |m_k| \rangle^2), & T < T_k, \\ (NK) \langle m_k^2 \rangle, & T \geq T_k, \end{cases} \quad (4)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N$  — число частиц,  $m$  — магнитный параметр порядка,  $m_k$  — киральный параметр порядка,  $\chi_k$  — киральная восприимчивость.

Параметр порядка системы  $m$  вычислялся по формуле [6]

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\frac{1}{3} \langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle}, \quad (5)$$

где  $M_A$ ,  $M_B$  и  $M_C$  — соответственно намагниченности трех подрешеток.

Намагниченность подрешетки определялась следующим образом [6]:

$$\langle |M_r| \rangle = \langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \rangle, \quad r = A, B, C. \quad (6)$$

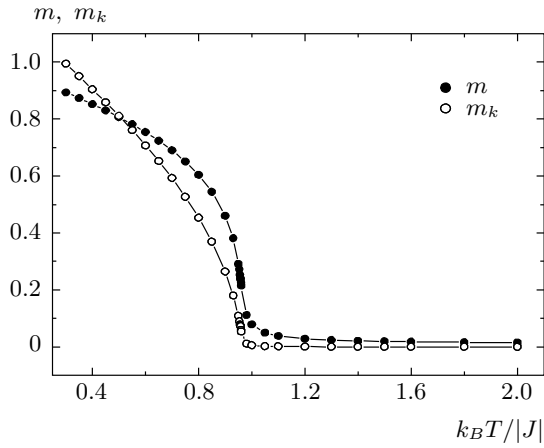


Рис. 1. Зависимость магнитного  $m$  и кирального  $m_k$  параметров порядка от температуры  $k_B T / |J|$

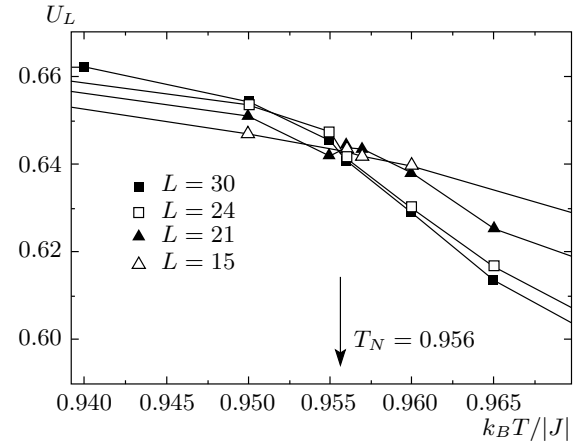


Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$

Наряду с вектором антиферромагнетизма величиной, характеризующей особенности упорядочения, является и спиновая киральность, флуктуации которой связаны с новыми критическими индексами  $\beta_k$ ,  $\gamma_k$  и  $\nu_k$  [7, 8, 20]. Для вычисления кирального параметра порядка системы  $m_k$  использовались следующие выражения [7, 8]:

$$m_{kp} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle ij \rangle} [S_i \times S_j]_p, \quad (7)$$

$$m_k = \frac{1}{N} \sum_p m_{kp}, \quad (8)$$

где  $p = (x, y, z)$  — компоненты вектора.

На рис. 1 представлены характерные зависимости магнитного  $m$  и кирального  $m_k$  параметров порядка от температуры для системы с линейными размерами  $L = 30$  и  $R = 1$ .

Отметим, что в широкой области низких температур температурные зависимости магнитного и кирального параметров порядка достаточно сильно различаются, но в критической области эта зависимость принимает почти одинаковый характер. Отметим, что температуры фазового перехода для магнитного и кирального параметров порядка совпадают или очень близки.

Для более точного определения критической температуры  $T_N$  нами использовался метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка, который имеет вид [14]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (9)$$

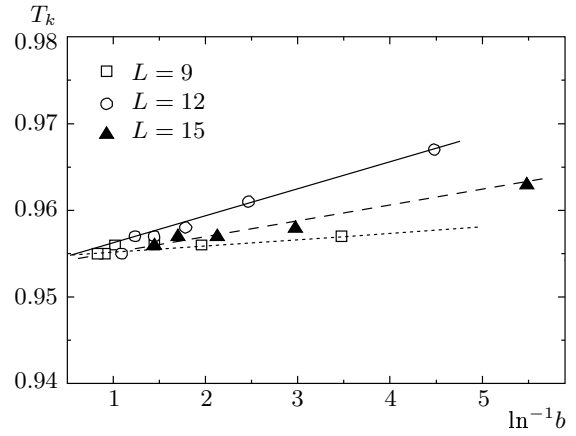


Рис. 3. Зависимость температуры  $T_k$  от  $\ln^{-1}(L'/L)$  для разных  $L$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых  $U_L$  в их температурной зависимости является критической точкой [29].

На рис. 2 представлена характерная зависимость  $U_L$  от температуры для магнитного параметра порядка. На графике видно, что критическая температура для  $R = 1$  равна  $T_N = 0.956(2)$ .

При определении киральной критической температуры  $T_k$  нами использовался метод пересечения кумулянтов (cumulant crossing), который считается более точным и надежным [8, 14, 15]. Согласно этому методу, зависимости  $U_L(T)$  для систем разных размеров строятся в приведенных масштабах  $\ln^{-1}(L'/L)$ , где  $L'$  и  $L$  — размеры двух систем,

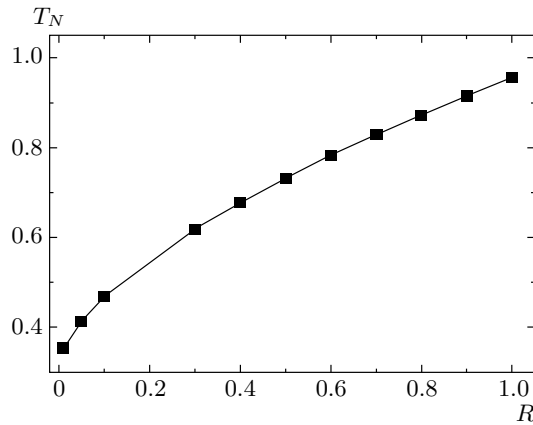


Рис. 4. Зависимость критической температуры  $T_N$  от  $R$

причем  $L' > L$ . Экстраполяция температуры при  $\ln^{-1}(L'/L) \rightarrow 0$  соответствует критической температуре для бесконечной системы  $T_k(L \rightarrow \infty)$ . На рис. 3 представлена характерная зависимость температуры  $T_k$  от величины  $\ln^{-1}(L'/L)$  для разных  $L$ . Как видно на графике, все данные для разных  $L$  ложатся на прямые, которые при  $\ln^{-1}(L'/L) \rightarrow 0$  сходятся к одной точке. Эта точка соответствует значению киральной критической температуры  $T_k = 0.955(2)$ , которая в пределах погрешности практически совпадает со значением магнитной критической температуры  $T_N = 0.956(2)$ . Об этом свидетельствуют и результаты работ [7, 8].

С помощью этого метода нами были определены значения критических температур для всех  $R$ . На рис. 4 приведена фазовая диаграмма, характеризующая зависимость критической температуры от величины межслойного обменного взаимодействия. Отметим нелинейную зависимость  $T_N$  от  $R$ .

Температурные зависимости теплоемкости (рис. 5) и восприимчивости (рис. 6) имеют хорошо выраженные максимумы в критической области. При этом уменьшение соотношения межслойного и внутрислойного обменов ведет к уменьшению температуры фазового перехода и, соответственно, смещению максимумов теплоемкости и восприимчивости в сторону низких температур. Для восприимчивости это смещение сопровождается увеличением максимумов. В то время как максимумы теплоемкости сначала, как и для восприимчивости, растут, затем при  $R \leq 0.05$  наблюдается постепенное уменьшение. Для восприимчивости аналогичное поведение не наблюдается и максимум продолжает расти с уменьшением  $R$ .

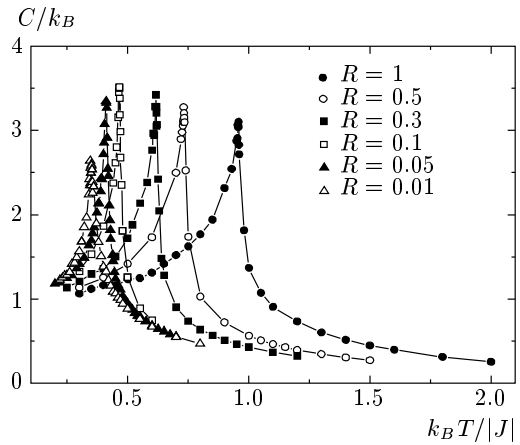


Рис. 5. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L = 24$

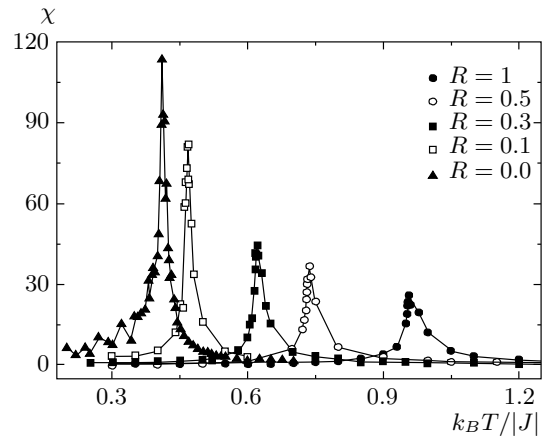


Рис. 6. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L = 24$

Для расчета статических киральных и магнитных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ , намагнитченности  $\beta$ ,  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$  использовались соотношения теории конечно-размерного скейлинга [5, 14–17, 28].

Из соотношений КРС следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T = T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие законы [4, 8, 16–19, 28]:

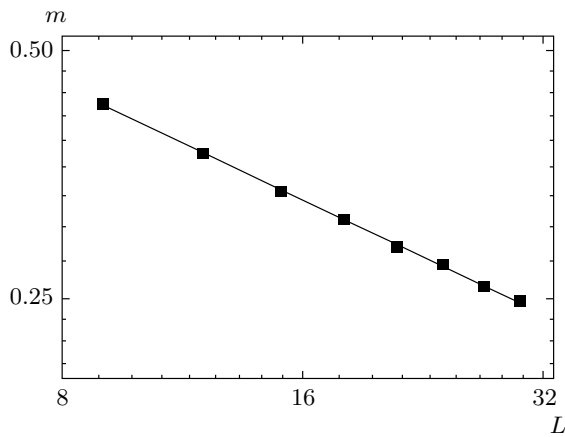


Рис. 7. Зависимость параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \tag{10}$$

$$m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}, \tag{11}$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \tag{12}$$

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}, \tag{13}$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{14}$$

$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_{nk}}, \tag{15}$$

где  $g_{V_n}$  — некоторая постоянная, а в качестве  $V_n$  и  $V_{nk}$  могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, 3, 4, \tag{16}$$

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{\langle m_k^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, 3, 4. \tag{17}$$

Эти выражения были использованы нами для определения  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ ,  $\nu$  и  $\nu_k$ . Аналогичное выражение для теплоемкости, как уже было показано в работах [9, 18], не применимо и для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$  на практике, как правило, используется выражение [6–8]

$$C_{max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \tag{18}$$

где  $A_1$  и  $A_2$  — некоторые коэффициенты.

На рис. 7 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров решетки  $L$ . Как видно на рисунке, все данные «ложатся» на прямую, угол наклона которой определяет значение  $\beta/\nu$ . По этой схеме определены значения  $\alpha/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ ,  $1/\nu$  и  $1/\nu_k$  для всех значений  $R$ . Затем с помощью полученных в рамках данного исследования значений  $\nu$  и  $\nu_k$  рассчитывались  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,

$\gamma$  и  $\gamma_k$ . Все значения индексов, полученные таким образом, представлены в табл. 1, 2, 3. В табл. 1 для сравнения приведены данные, полученные в работах [6–8, 20], и имеющиеся экспериментальные данные (см. ссылки в работе [20]).

Особо следует отметить процедуру, использованную нами для определения индекса Фишера  $\eta$ . С помощью отношений между восприимчивостью  $\chi$  и радиусом корреляции  $\xi$  [30]

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}, \tag{19}$$

а также соотношения  $\eta = 2 - \gamma/\nu$ , связывающего индексы  $\eta$  и  $\nu$ , получим

$$\ln(\chi/\xi^2) = c - \eta \ln \xi, \tag{20}$$

где  $c$  — некоторая константа. Для систем с конечными размерами  $\xi = L$ . Тогда при  $T = T_N$  имеем

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L. \tag{21}$$

На основе выражения (21) было определено значение индекса Фишера  $\eta$ . Эти данные также представлены в табл. 1.

Отметим, что значения индексов  $\nu$  и  $\nu_k$ , рассчитанные на основе репличного алгоритма метода МК, в пределах погрешности совпадают с теми, что получены в работах [7, 8]. Результаты нашей работы показывают, что  $\nu = \nu_k$ . Индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  отличаются от данных работы [7], но в пределах погрешности совпадают с результатами работы [6, 8, 20]. Индексы  $\beta_k$  и  $\gamma_k$  близки к результатам работы [20]. Киральные и магнитные критические индексы, полученные в данной работе, не совпадают. Что касается критических температур  $T_N = 0.957(2)$  и  $T_k = 0.955(2)$ , определенной в данном исследовании и в работах [6–8], то они практически совпадают. Как видно в табл. 1, результаты нашей работы хорошо согласуются как с данными лабораторного эксперимента, так и с большинством результатов численных экспериментов других авторов, но отличаются от результатов для нефрустрированной модели Гейзенберга [4]. Это позволяет нам говорить, что фрустрированная антиферромагнитная 3D-модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке образует новый класс универсальности критического поведения.

Серьезный интерес представляет вопрос о зависимости критических индексов от  $R$ . Для изучения этого вопроса были выполнены исследования при различных значениях  $R$  в пределах  $R = 0.01$ – $1.0$ , потребовавшие большого объема вычислительной работы.

**Таблица 1.** Значения критических параметров для антиферромагнитной 3D-модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке

Критический параметр	Данные этой работы		Метод МК			Эксперимент (см. ссылки в [20])	Чистая модель (см. ссылки в [4])
	Алгоритм Метрополиса	Репличный алгоритм	[6]	[7]	[8]		
$T_N$	0.957(2)	0.956(1)	0.954(2)	0.955(2)	0.9577(2)	—	1.443
$T_k$	0.955(2)	0.956(1)	—	0.958(2)	0.9577(2)	—	—
$\nu$	0.53(2)	0.57(1)	0.53(3)	0.59(2)	0.586(8)	0.54(3)	0.706(9)
$\alpha$	0.37(2)	0.40(1)	0.4(1)	0.24(8)	—	0.39(9)	-0.117(2)
$\beta$	0.26(2)	0.26(1)	0.25(2)	0.30(2)	0.285(11)	0.25(1)	0.364(7)
$\gamma$	1.11(2)	1.19(1)	1.1(1)	1.17(7)	1.185(3)	1.10(5)	1.390(23)
$\nu_k$	0.60(2)	0.57(1)	—	0.60(2)	0.60(2)	—	—
$\beta_k$	0.45(2)	0.43(1)	—	0.55(2)	0.50(2)	0.44(2)	—
$\gamma_k$	0.93(2)	0.79(1)	—	0.72(2)	0.82(2)	0.84(7)	—
$\eta$	-0.10(5)	-0.09(3)	—	—	—	—	0.031(7)

**Таблица 2.** Значения магнитных критических параметров для антиферромагнитной 3D-модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке

$R$	$T_N$	$\nu$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
1	0.956(1)	0.59(2)	0.26(2)	0.26(2)	1.23(3)	2.02
0.8	0.872	0.60	0.24	0.26	1.26	2.02
0.7	0.829	0.61	0.22	0.28	1.29	2.07
0.6	0.783	0.59	0.22	0.29	1.22	2.02
0.4	0.677	0.60	0.24	0.27	1.27	2.05
0.3	0.619	0.60	0.26	0.29	1.23	2.07
0.1	0.468	0.59	0.24	0.28	1.17	1.97
0.05	0.413	0.55	0.15	0.22	1.11	1.70
0.01	0.353	0.48	0.09	0.27	0.82	1.45

**Таблица 3.** Значения киральных критических параметров для антиферромагнитной 3D-модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке

$R$	$T_k$	$\nu_k$	$\alpha$	$\beta_k$	$\gamma_k$	$\alpha+2\beta_k+\gamma_k=2$
1	0.956(2)	0.59(2)	0.26(2)	0.43(2)	0.87(3)	1.99
0.8	0.872	0.60	0.24	0.42	0.96	2.04
0.7	0.829	0.61	0.22	0.48	0.96	2.14
0.6	0.783	0.59	0.22	0.46	0.85	1.99
0.4	0.677	0.60	0.24	0.43	0.90	2
0.3	0.619	0.60	0.26	0.48	0.81	2.03
0.1	0.468	0.59	0.24	0.47	0.82	2
0.05	0.413	0.55	0.15	0.31	0.60	1.37
0.01	0.353	0.48	0.09	0.40	0.52	1.41

С помощью соотношений теории конечно-размерного скейлинга и описанной выше процедуры были рассчитаны все основные статические киральные и магнитные критические индексы для этой модели при различных значениях  $R$ . Значения индексов, полученные таким образом, представлены в табл. 2 и 3.

Как видно в табл. 2 и 3, для всех значений  $R > 0.05$  в пределах погрешности значения индексов совпадают и с достаточно высокой точностью выполняются скейлинговые соотношения между критическими индексами. При этом значения критических индексов в интервале значений от  $R = 1.0$  до  $R = 0.05$  не зависят от  $R$ . При  $R \leq 0.05$  значе-

ния критических индексов существенно меняются и уже не выполняются скейлинговые соотношения между ними. Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что значения критических индексов в достаточно широком интервале изменения  $R$  не меняются. По-видимому, значение  $R = 0.05$  можно считать граничным, после которого в системе происходит кроссовер от трехмерного критического поведения к двумерному. Отметим, что реальный антиферромагнетик на треугольной решетке  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ , для которого  $R = 0.04$ , характеризуется авторами работ [21, 22] как квазидвумерный, и это значение  $R$  практически совпадает с нашей оценкой.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наши исследования критических свойств фрустрированной антиферромагнитной  $3D$ -модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке, выполненные с использованием как классического алгоритма метода Монте-Карло (алгоритм Метрополиса), так и высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло, позволили рассчитать все основные статические магнитные и киральные критические индексы. Расчет критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ , параметров порядка  $\beta$ ,  $\beta_k$ , индекса Фишера  $\eta$  и радиусов корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$  выполнен на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга и с соблюдением единой методики в рамках одного исследования. Полученные данные свидетельствуют о принадлежности фрустрированной  $3D$ -модели Гейзенберга на треугольной слоистой решетке к новому классу универсальности. Обнаружено, что класс универсальности критического поведения этой модели сохраняется вплоть до значения межслойного обменного взаимодействия  $R = 0.05$ , и при дальнейшем уменьшении величины  $R$  наблюдается переход от трехмерного критического поведения к двумерному.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00194), РФФИ-«Юг России» (грант № 06-02-96602), в рамках программы по поддержке ведущих научных школ (НШ-5547.2006.2), а также Фонда содействия отечественной науке (А. К. Муртазаев).

#### ЛИТЕРАТУРА

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. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
4. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
5. Д. Лойсон, А. И. Соколов, Б. Деламотт и др., Письма в ЖЭТФ **72**, 447 (2000).
6. Н. Я. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 474 (1987).
7. Н. Я. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
8. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
9. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **120**, 1535 (2001).
10. В. В. Прудников, С. В. Белим, Е. В. Осинцев, А. А. Федоренко, ЖЭТФ **114**, 972 (1998).
11. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, Х. К. Алиев, В. А. Мутайламов, ЖЭТФ **117**, 559 (2000).
12. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, E-print archives, cond-mat/0012021.
13. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
14. K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
15. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).
16. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, Phys. Rev. **185**, 832 (1969).
17. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
18. D. P. Landau, Physica A **205**, 41 (1994).
19. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
20. С. В. Малеев, УФН **172**, 617 (2002).
21. L. E. Svistov, A. I. Smirnov, L. A. Prozorova et al., Phys. Rev. B **67**, 094434 (2003).
22. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова и др., Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
23. D. Loison, E-print archives, cond-mat/0504326.
24. Р. С. Гехт, ЖЭТФ **102**, 1968 (1992).
25. Р. С. Гехт, УФН **159**, 2 (1989).
26. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
27. K. Binder and J.-Sh. Wang, J. Stat. Phys. **55**, 87 (1989).
28. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
29. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
30. Ch. Holm and W. Janke, Phys. Rev. B **48**, 936 (1993).