

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло

И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев

В обзоре рассмотрено современное состояние исследований фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло. Обсуждаются результаты, полученные как классическими, так и квантовыми методами Монте-Карло. Основное внимание уделено результатам, полученным при изучении статистических критических явлений в решеточных моделях с расчетом критических индексов с большой точностью. Показано, что конечно-размерный скейлинг является эффективным методом исследования критических свойств не только простых решеточных моделей, но и моделей сложных реальных магнитных материалов. Продемонстрировано, что при исследовании моделей, в которых возможны кроссоверные явления, анализ Монте-Карло данных необходимо выполнять как на основе представлений теории конечно-размерного скейлинга, так и на основе традиционных степенных функций.

PACS numbers: 02.70.Lq, 64.60.-i, 75.40.-s, 75.50.-y

Содержание

1. Введение (773).
 2. Методы Монте-Карло в статистической физике (775).
2.1. Классический метод Монте-Карло. 2.2. Квантовые методы Монте-Карло.
 3. Исследование фазовых переходов и статических критических явлений в модельных системах (778).
 4. Фазовые переходы и критические явления в квантовых решеточных системах (780).
 5. Исследование фазовых переходов и критических явлений в моделях реальных магнитных материалов (782).
5.1. Критические явления в малых магнитных частицах.
5.2. Фазовые переходы и критические явления в "макросистемах".
5.3. Конечно-размерный скейлинг и критические индексы моделей реальных магнетиков.
 6. Динамическое критическое поведение: исследования методами Монте-Карло (790).
 7. Заключение (793).
- Список литературы (793).

1. Введение

В последние годы достигнут значительный прогресс в понимании проблемы фазовых переходов и критических

явлений. Наиболее плодотворными в этой области оказались идеи, заложенные в гипотезах скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы (РГ) [1–4]. Предшественником этих "микроскопических" подходов явилась феноменологическая теория фазовых переходов (ФП) второго рода Ландау, в рамках которой впервые были вычислены критические индексы (КИ). Но численные значения этих индексов не совпадали с экспериментально определенными для магнетиков, сегнетоэлектриков и жидкостей. Впервые на необходимость учета пространственно неоднородных флуктуаций параметра порядка в теории Ландау указал В.Л. Гинзбург [5]. Был выработан критерий применимости теории Ландау и показано, что эта теория справедлива до тех пор, пока флуктуации параметра порядка, усредненные в объеме с размерами порядка длины когерентности, малы по сравнению с самим параметром порядка. Осознание фундаментального значения идеи о необходимости учета флуктуаций параметра порядка сыграло основополагающую роль в формулировке вышеупомянутых "микроскопических" теорий и подходов. В дальнейшем на их основе было получено большинство важнейших результатов современной теории ФП и критических явлений (КЯ), установлены основные закономерности, наблюдающиеся в критической области, получены соотношения между критическими индексами и критическими амплитудами (КА), построены уравнения состояния, рассчитаны значения КИ и КА. Численные значения КИ и КА, полученные на основе РГ и ϵ -разложения, считаются наиболее точными и надежными из всех приближенных результатов, полученных на сегодняшний день [6–8]. Идеи, лежащие в основе всех этих предположений, значительно обогатили понимание природы критических явлений. Тем не менее мы вынуждены констатировать, что строгой и последовательной

И.К. Камилов, А.К. Муртазаев. Институт физики ДНЦ РАН
367003 Махачкала, ул. М. Ярагского 94, Российская Федерация
Тел. (8-8722) 62-89-60

Х.К. Алиев. Дагестанский государственный университет
367025 Махачкала, ул. М. Гаджиева 43а, Российская Федерация
Тел. (8-8722) 67-59-65

Статья поступила 1 апреля 1999 г.

микроскопической теории фазовых переходов второго рода и критических явлений на сегодняшний день не существует [9]. Значительная часть теоретических результатов, полученных в последние годы, основана на использовании методов РГ. Но некоторые положения и приемы, используемые в РГ, нельзя считать строго доказанными [2]. К тому же остается не до конца решенным вопрос о влиянии неидеальных черт, присущих реальным системам, на результаты исследования КЯ. Центр тяжести теоретических исследований сместился теперь к изучению более реалистичных моделей и учету многочисленных усложняющих факторов, присущих реальным системам, но не учитываемых в моделях первого приближения (классические модели Изинга, Гейзенберга и т.д.). К ним могут быть отнесены анизотропия и примеси, многоспиновый обмен, диполь-дипольное взаимодействие, учет колебаний решетки и ряд других [2]. Строгое исследование таких систем на основе микроскопических гамильтонианов методами современной теоретической физики — задача чрезвычайно сложная. Эти и некоторые другие причины привели к тому, что фазовые переходы и критические явления интенсивно исследуются методами численного эксперимента (ЧЭ) — методами Монте-Карло (МК) и молекулярной динамики (МД) [10–18]. Сейчас, по-видимому, настал новый этап в исследованиях ФП и КЯ, который можно характеризовать как "компьютерный". Для сравнения на рис. 1 и рис. 2 представлены значения критического индекса радиуса корреляции ν (здесь и далее для обозначения критических индексов используются общепринятые символы) и обратной критической температуры $K_c = J/k_B T$, полученные разными методами соответственно для модели Изинга и Гейзенберга. При этом количественное изучение непосредственно самой критической области методами МК стало возможно только в самые последние годы. Тем не менее результаты, получаемые этими методами, к настоящему времени не уступают по точности лучшим данным других методов, а иногда и превосходят их [16, 17]. Вопрос точности теперь в большей степени зависит от вычислительных мощностей, имеющихся в распоряжении исследователя, используемого им алгоритма и от его опыта. К тому же методы МК обладают рядом ценных преимуществ, связанных не только с их строгой математической обоснованностью и возможностью контроля за погрешностью в рамках

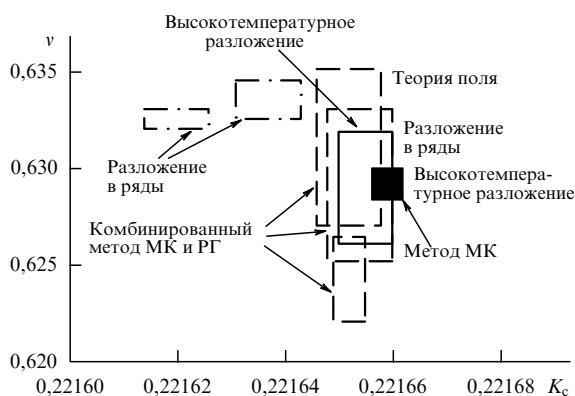


Рис. 1. Значения обратной критической температуры K_c и критического индекса радиуса корреляции ν для $3d$ модели Изинга на простой кубической решетке, полученные разными методами [146].

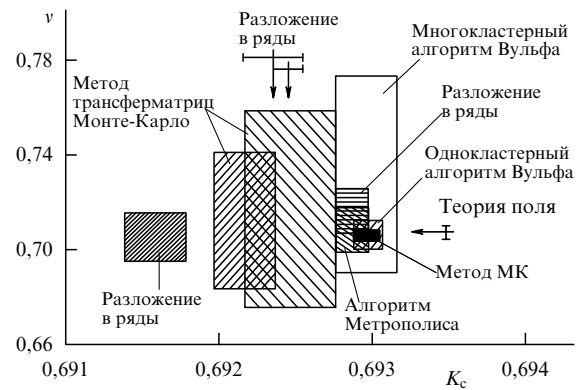


Рис. 2. Значения обратной критической температуры K_c и критического индекса радиуса корреляции ν для $3d$ модели Гейзенберга на простой кубической решетке, полученные разными методами [147].

самого метода, но и с тем, что МК данные можно сопровождать "физической" картиной происходящих процессов и большим объемом детальной сопутствующей информации. Некоторые характерные трудности, присущие методам МК, поддаются учету, и их влияние на результаты вычислительного эксперимента можно контролировать [10, 12, 15].

Методами МК хорошо изучено большое количество модельных систем, подверженных фазовым переходам. Результаты таких исследований описаны в литературе (см. обзоры [10, 16–18]). Но при этом до сих пор основное внимание уделялось простым ферромагнитным системам со взаимодействием между ближайшими соседями. Исследованию же реальных материалов с учетом их конкретных кристаллографических особенностей при наличии многоспиновых, релятивистских взаимодействий и взаимодействий между более далекими соседями уделялось значительно меньше внимания. Кроме того, в большинстве работ, где использовался метод МК для исследования решеточных систем, критическая область изучалась лишь на качественном уровне. Исходя из этого, в данном обзоре нами будут рассмотрены в основном результаты, полученные именно при исследовании систем вблизи и непосредственно в самой критической точке. Из обширного материала, который имеется по данной теме, мы остановимся лишь на работах, где получены оригинальные результаты, позволяющие ответить на некоторые принципиальные вопросы, где вычислены КИ и КА с большой точностью и использованы новые методы и подходы к исследованию ФП и КЯ. Даже в этом случае мы вынуждены ограничиться рассмотрением решеточных систем с уделением основного внимания моделям, описывающим магнитные ФП и КЯ, где, по-видимому, достигнут наибольший прогресс, и надеемся, что это в какой-то мере восполнит существующий пробел, связанный с отсутствием в отечественной литературе обзора результатов в этом направлении за последние годы.

В данной работе мы будем придерживаться следующей схемы изложения материала. Вначале дадим очень краткое описание классического варианта метода МК в статистической физике (алгоритм Метрополиса) и рассмотрим некоторые новейшие высокоэффективные алгоритмы метода МК, а также обсудим квантовые методы МК со схематичным изложением подхода Хэндскомба. В

разделе 3 обсудим результаты, полученные при изучении фазовых переходов и статических критических явлений в модельных системах. Раздел 4 посвящен исследованиям фазовых переходов и критических явлений в квантовых решеточных системах. Результаты исследования моделей реальных магнитных материалов на основе микроскопических гамильтонианов представлены в разделе 5. Данные, полученные при исследовании критической динамики методами МК, рассмотрены в разделе 6.

2. Методы Монте-Карло в статистической физике

2.1. Классический метод Монте-Карло

Рассмотрим канонический ансамбль из N частиц в объеме V при температуре T . Поскольку нами рассматриваются регулярные решеточные модели, то переменная V может быть опущена. Таким образом, будем иметь дело с двумя термодинамическими параметрами, N и T . При изложении материала будем придерживаться "магнитной" терминологии.

В статистической механике термодинамические средние любой гладкой функции $f(\mathbf{x})$ записываются в виде [19]

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \frac{\int_V f(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_V P(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}, \quad (2.1)$$

где $P(\mathbf{x})$ — ненормированная плотность вероятности для N -мерного вектора \mathbf{x} в области V , $\mathbf{x} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, где \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -й частицы;

$$\int_V d\mathbf{x} = \int_V d\mathbf{r}_1 \dots \int_V d\mathbf{r}_N, \quad (2.2)$$

$$P_{\text{eq}}(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x}) \sim \exp\left(-\frac{H_N(\mathbf{x})}{k_B T}\right).$$

Здесь $H_N(\mathbf{x})$ — гамильтониан системы, k_B — постоянная Больцмана. К сожалению, интегралы типа (2.1), вычисленные разбижкой области V и случайным выбором точек (метод МК), большого интереса для задач статистической физики не представляют. Вариант метода МК, используемый в статистической механике, основан на идее существенной выборки [10–12, 20, 21]. В этом варианте точки фазового пространства V выбираются в соответствии с вероятностью, пропорциональной больцмановскому фактору (2.2). Тогда выражение (2.1) может быть представлено в следующем виде:

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle \approx \overline{f(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=1}^M f(\mathbf{x}_i) P^{-1}(\mathbf{x}_i) \exp(-H(\mathbf{x}_i)/k_B T)}{\sum_{i=1}^M P^{-1}(\mathbf{x}_i) \exp(-H(\mathbf{x}_i)/k_B T)}. \quad (2.3)$$

При выборе $P(\mathbf{x}_i)$ в соответствии с (2.2) выражение (2.3) превращается в среднеарифметическое:

$$\overline{f(\mathbf{x})} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\mathbf{x}_i). \quad (2.4)$$

В реальных случаях точное значение $P_{\text{eq}}(\mathbf{x}_i)$ неизвестно, поэтому одним из способов реализации может быть случайное блуждание $\{\mathbf{x}_i\}$ в фазовом пространстве с помощью марковского процесса так, чтобы $\lim_{i \rightarrow \infty} P(\mathbf{x}_i) = P_{\text{eq}}(\mathbf{x}_i)$. Марковский процесс определяется

вероятностью перехода $W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j)$ из одной точки фазового пространства \mathbf{x}_i в другую точку \mathbf{x}_j . Одним из способов определения $W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j)$ может быть выполнение условия микроскопической обратимости

$$P_{\text{eq}}(\mathbf{x}_i) W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) = P_{\text{eq}}(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x}_j \rightarrow \mathbf{x}_i). \quad (2.5)$$

В соответствии с (2.5) отношение переходных вероятностей зависит только от изменения энергии $\Delta H = H_N(\mathbf{x}_j) - H_N(\mathbf{x}_i)$:

$$\frac{W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j)}{W(\mathbf{x}_j \rightarrow \mathbf{x}_i)} = \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right). \quad (2.6)$$

Уравнение (2.6) не определяет выбор $W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j)$ однозначно, поэтому в соответствии с алгоритмом Метрополиса [20–22] выбор осуществляется следующим образом:

$$W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j) = \begin{cases} \frac{1}{N}, & \text{если } \Delta H \leq 0, \\ \frac{1}{N} \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right), & \text{если } \Delta H > 0, \\ 1 - \sum_{i \neq j} W(\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}_j), & \text{если } i = j. \end{cases} \quad (2.7)$$

Указанная схема, основанная на использовании существенной выборки, вдали от критической области обеспечивает достаточно хорошую точность оценки $f(\mathbf{x})$ при сравнительно малом числе МК шагов на частицу (порядка $10^3 - 10^4$). Отметим, что погрешность вычисления среднего $\overline{f(\mathbf{x})}$ при этом оценивается как

$$(\delta f(\mathbf{x}))^2 \approx \frac{1}{M(M-1)} \sum_{i=1}^M (\overline{f(\mathbf{x})} - f(\mathbf{x}_i))^2, \quad (2.8)$$

где $M \gg 1$, M — число частичных средних за K_0 шагов. Если считать, что полная длина цепи равна K , то $M = K/K_0$.

Многочисленные исследования, выполненные методами МК, убедительно показали, что эти методы являются ценным инструментом для изучения классических систем [10–18, 20–22]. Однако вблизи критической точки эффективность этого метода резко падает, и мы сталкиваемся с проблемой так называемого критического замедления. Критическое замедление, вероятно, есть наиболее серьезный источник трудностей при исследовании фазовых переходов и критических явлений методами МК.

Согласно современным представлениям теории фазовых переходов и критических явлений время релаксации системы в точке фазового перехода T_c расходится как [1, 2]

$$\tau \sim \xi^z, \quad (2.9)$$

где ξ — корреляционная длина $\xi \sim (T/T_c - 1)^{-\nu}$, z — динамический критический индекс. Характерное значение z для многих моделей есть 2 [1, 2]. Таким образом, время релаксации системы очень быстро растет при $T \rightarrow T_c$. Увеличение времени релаксации $\tau \rightarrow \infty$ делает вышеописанный стандартный метод МК неэффективным вблизи точек фазовых переходов второго рода. Эта

неэффективность обусловлена тем, что в алгоритме Метрополиса МК испытание заключается в попытке переворота одного спина, тогда как эффекты, связанные с фазовыми переходами, обусловлены флуктуациями спиновых кластеров больших размеров.

Для систем с конечными размерами, используемых при компьютерном моделировании, размеры кластеров ограничены размерами самой системы L [18]. В этом случае τ при $T = T_c$ определяется как

$$\tau \sim L^z. \quad (2.10)$$

В последние годы предложен ряд новых алгоритмов для метода МК, позволяющих в той или иной мере преодолеть проблему критического замедления. К ним можно отнести многосеточные (multigrid) алгоритмы [23–28]; оверрелаксационные (over-relaxation) алгоритмы [29–32]; алгоритмы, основанные на идеях ренормализационной группы [33–36]; кластерные алгоритмы [37–40]. Среди последних наибольшую популярность завоевали различные варианты, основанные на идеях перколяционных переходов [37, 38].

Имеется и ряд других подходов, в которых используются различные гибридные алгоритмы, направленные на преодоление конкретных частных проблем [41–43]. Например, в [42] предложен вариант метода МК (Replica Monte Carlo Method), предназначенный для повышения эффективности кластерных алгоритмов применительно к системам с фрустрациями, а в [43] — применительно к изучению моделей спиновых стекол (этот алгоритм был применен к изинговским спиновым стеклам с размерностью пространства $d = 2, 3, 4$ [42, 44–46]).

Среди всех новых алгоритмов своей эффективностью выделяются два: многокластерный алгоритм Свендсена–Янга (Swendsen–Jang) [37] и однокластерный алгоритм Вольфа (Wolff) [38]. Коротко рассмотрим их суть.

Алгоритм Свендсена — Янга основан на двух преобразованиях:

1) спиновая конфигурация заменяется конфигурацией связей, основанной на спинах;

2) конфигурация связей используется, чтобы сконструировать новую конфигурацию спинов.

Оба преобразования основаны на использовании случайных чисел.

Связи между ближайшими соседями S_j выбранного спина S_i устанавливаются с вероятностью $P = 1 - \exp(-K)$, где $K = J/k_B T$, если S_j имеет то же самое значение, что и S_i . Если соседние спины S_i и S_j имеют разные значения, между ними связь не устанавливается и они одному кластеру принадлежать не могут. В пределах одного кластера все спины имеют одинаковые значения. Затем выбранный спин S_i подвергается МК испытанию. При принятии нового значения для S_i такое же значение присваивается всем спинам данного кластера. Затем процедура повторяется, стартуя уже с новой конфигурации.

Алгоритм особенно эффективен при векторизации расчетов и при больших размерах решеток. О высокой эффективности метода говорят и значения z , полученные для модели Изинга. Например, для системы $d = 2$ $z \approx 2, 1$ при стандартном алгоритме и $z \approx 0, 35$ при использовании алгоритма Свендсена–Янга. Для трехмерной модели Изинга обычный алгоритм дает $z \approx 2$, а алгоритм Свендсена–Янга дает $z \approx 0, 55$ [37]. Этот алгоритм легко обобщается на случай учета антиферромагнитных взаимодействий и наличия внешних магнитных полей [37].

Однокластерный алгоритм Вольфа [38] отличается от рассмотренного двумя особенностями:

1) вокруг выбранного спина S_i , как и в алгоритме Свендсена–Янга, формируется кластер; после просмотра всех ближайших соседей с вероятностью $P = 1 - \exp(-K)$ в кластер включаются вторые ближайшие соседи, имеющие такое же значение спина; эта процедура продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты границы системы;

2) полученный кластер переворачивается с вероятностью, равной 1.

Особенности применения этого алгоритма к моделям с непрерывной симметрией рассмотрены в [38].

Отметим, что для трехмерной модели Изинга этот алгоритм дает значение $z \approx 0, 4$, что свидетельствует о его более высокой эффективности по сравнению с алгоритмом Свендсена–Янга.

Оба эти алгоритма эргодичны и нелокальны. Несмотря на то, что на практике они широко используются, все еще остается ряд вопросов, связанных с эффективностью этих алгоритмов как при сравнении между собой, так и применительно к тем или иным моделям [39]. Например, согласно [41] главная причина более высокой эффективности алгоритма Вольфа заключается в том, что средний размер переворачиваемого кластера больше, чем в случае алгоритма Свендсена–Янга.

Отметим также, что некоторые алгоритмы являются неэргодичными (Replica Monte Carlo Method), а некоторые соответствуют микроскопическому ансамблю (over-relaxation), и их необходимо использовать в сочетании с другими алгоритмами, например с алгоритмом Метрополиса [22].

2.2. Квантовые методы Монте-Карло

К настоящему времени возможность эффективного применения методов МК к изучению свойств квантовых систем (в частности, решеточных моделей с произвольным значением спина в широком диапазоне изменения различных физических параметров) все еще остается проблематичной. К настоящему времени имеется несколько разных подходов к использованию процедуры МК в задачах такого рода.

Один из подходов основан на использовании формулы Троттера [47–52]

$$\exp\left(\sum_{i=1}^p A_i\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\exp\left(\frac{A_1}{n}\right) \exp\left(\frac{A_2}{n}\right) \dots \exp\left(\frac{A_p}{n}\right) \right)^n, \quad (2.11)$$

которая переводит любую d -мерную квантовомеханическую систему в $(d+1)$ -мерную классическую общего типа. Этот метод опробовался на одномерной поперечной модели Изинга [53], на одномерной модели Гейзенберга и на XY-модели [54, 55]. В большинстве из этих работ и особенно в [52] изучены эффекты, связанные с конечностью добавочной размерности (n). Обычно дополнительную размерность рассматривают как дискретную "мнимую временную" размерность ($0 < n < \beta$, $\beta = 1/k_B T$). Использование формулы (2.11) приводит к разбиению шкалы мнимого времени на N дискретных интервалов длины Δn ($\beta = N\Delta n$) и справедливо, когда добавочная "временная" размерность бесконечна, что, конечно, не реализуется на ЭВМ. Это означает, что в МК расчетах, использующих этот подход, наряду с обыч-

ными погрешностями метода МК возникает еще дополнительная $\sim \Delta t^2$, связанная с конечностью "временного" интервала. При понижении температуры для сохранения заданной точности приходится увеличивать число "временных" разбиений N , следствием чего является увеличение времени счета и рост статистических ошибок. В результате расчеты в низкотемпературном интервале становятся чрезвычайно затруднительными. Тем не менее этот подход успешно применялся для изучения широкого класса различных систем. На его основе нашими соотечественниками выполнен ряд интересных исследований по изучению бозонных, фермионных [56–62], а также магнитных спиновых систем [63–65]. За последние годы этот подход получил довольно мощное развитие. Высокоэффективный вариант метода МК, использующий разложение Троттера для экспоненты Гиббса (2.11), был предложен в работе Эвертса с коллегами [66]. Этот, так называемый петлевой (loop) алгоритм отличается быстрой сходимостью (до 100 раз быстрее обычного) за счет использования большого канонического ансамбля и глобальных изменений состояния системы в процессе МК моделирования. Однако и этот вариант метода МК оказался малоприменимым для работы в области низких температур. Принципиально важный шаг был сделан в [67, 68], где было предложено отказаться от дискретного разложения Троттера и осуществить переход к непрерывному времени $0 < n < \beta$ ($\Delta t \rightarrow 0$), что делает метод асимптотически точным. Затем эта идея была развита в [69] применительно к петлевому алгоритму для спиновых систем. Однако эти подходы весьма специфичны, довольно сложны и для каждой модели необходимо приспособлять свой алгоритм. По-видимому, все эти проблемы удалось снять в формулировке точного метода МК Н.В. Прокофьеву, Б.В. Свистуну и И.С. Тупицыну [70, 71]. Их метод характеризуется быстрой сходимостью, позволяет работать в различных ансамблях и рассчитывать локальные и общие термодинамические величины, а также проводить исследования в любом температурном интервале. Для выяснения всех достоинств, а также возможных недостатков этого чрезвычайно интересного метода, очевидно, необходимо опробовать его на широком классе различных моделей.

В квантовом методе МК имеется еще один подход, который рассматривает статистическую сумму как сумму всевозможных произведений взаимодействующих частей в системе, и здесь, естественно, упомянутая проблема конечного "мнимого временного" интервала не возникает. Эти произведения образуют некоторое множество, на котором определяется цепь Маркова. Этот подход впервые был предложен в работе Хэндскомба [72] и применен для расчета термодинамических свойств ферромагнитной изотропной модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$ [73]. Подход Хэндскомба был несколько усовершенствован в работах [74, 75], где автору удалось вычислить некоторые критические индексы одномерной модели Гейзенберга с $S = 1/2$. Одномерная модель Гейзенберга со спином $S = 1/2$ изучалась также в работах [76–78], а XY-модель — в [79]. В этом направлении немало интересных результатов получено и в работах И.А. Фаворского и П.Н. Воронцова-Вельяминова с соавторами [80–87]. Распространение метода Хэндскомба на модели Изинга с поперечным полем, с дальнедействием и короткодействием выполнено в работах [81, 82].

Оригинальные результаты по исследованию квантовой модели Гейзенберга с многоспиновым обменом на простой кубической решетке со спином $S = 1/2$ представлены в работах [81, 83, 84]. Обобщение же этого подхода на модель Гейзенберга с многоспиновым обменом выполнено в [84]. Отметим, что исследования фазовых переходов первого рода квантовым методом МК в [81, 83] были выполнены впервые.

Здесь мы представим просто общую схему метода Хэндскомба, следуя работам [82, 85]. Пусть гамильтониан квантовомеханической системы имеет вид операторной суммы:

$$H = -2\mu H^* \sum_{i=1}^N S_i - 2J \sum_{i=1}^{N_b} S_{i(i)} S_{i'(i)} = H_0 + \sum_{i=1}^{N_b} H(i),$$

$$[H(i), H_0] = 0, \quad (2.12)$$

где N — число спинов, N_b — число связей, H^* — магнитное поле. Если теперь представить каноническое среднее оператора A в виде

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Sp}\{A \exp(-\beta H)\}}{\text{Sp}\{\exp(-\beta H)\}}, \quad (2.13)$$

то числитель (2.13) можно написать в виде

$$\text{Sp}\{A \exp(-\beta H)\} = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{C_r} \left[\frac{(-\beta)^r}{r!} \right] \text{Sp}\{A H(i_1) H(i_2) \dots$$

$$\dots H(i_r) \exp(-\beta H_0)\}, \quad (2.14)$$

где C_r — совокупность индексов i_1, i_2, \dots, i_r , определяющая связи; \sum_{C_r} — суммирование по всем r -элементным наборам индексов C_r . Изменяя порядок вычисления следа и суммирования, статистическую сумму можно представить в виде

$$Z = \text{Sp}\{\exp(-\beta H)\} = \text{Sp}\left\{\exp(-\beta H_0) \sum_{r=0}^{\infty} \left[\frac{(-\beta)^r}{r!} \right] \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{C_r} (H(i_1) H(i_2) \dots H(i_r)) \right\}. \quad (2.15)$$

Тогда среднее любой наблюдаемой величины A определяется как значение математического ожидания величины Ω_A , определенной в пространстве всевозможных последовательностей C_r , следующим образом:

$$\Omega_A(C_r) = \frac{\text{Sp}\{A H(i_1) H(i_2) \dots H(i_r) \exp(-\beta H_0)\}}{\text{Sp}\{H(i_1) H(i_2) \dots H(i_r) \exp(-\beta H_0)\}}. \quad (2.16)$$

Для построения марковской цепи можно воспользоваться связью спиновых операторов $S_i S_{i'}$ ($S = 1/2$) и операторов перестановки $E(t, t')$:

$$E(t, t') = \frac{1}{2} (4S_t S_{t'} + 1). \quad (2.17)$$

Оператор $E(t, t')$ меняет местами на решетке спины с номерами t и t' . Обозначим

$$\pi(C_r) = \left[\frac{(-\beta)^r}{r!} \right] \text{Sp}\{H(i_1) H(i_2) \dots H(i_r) \exp(-\beta H_0)\}. \quad (2.18)$$

В случае ферромагнетика $H(i) = -JE(t_i, t'_i)$, и тогда имеем

$$\begin{aligned} \pi(C_r) &= \left[\frac{(-\beta J)^r}{r!} \right] \left\{ \prod_{i_k=1}^r E(t(i_k), t'(i_k)) \exp(-\beta H_0) \right\} = \\ &= \left[\frac{(-\beta J)^r}{r!} \right] \prod_{j=1}^{K(C_r)} 2 \cosh \left(\frac{\mu \beta H a_j}{2k_B T} \right), \quad \pi(C_r) \geq 0, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где $K(C_r)$ — число циклических перестановок, к которому последовательность C_r может быть сведена; a_j — длина j -го цикла. В итоге статистическую сумму можно записать как сумму по $\pi(C_r)$:

$$Z = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{C_r} \pi(C_r), \quad (2.20)$$

и построить марковскую цепь на пространстве индексных наборов $\{C_r\}$ с распределением нормированной вероятности $P(C_r)$:

$$P(C_r) = \frac{\pi(C_r)}{Z} \geq 0, \quad \sum_{C_r} P(C_r) = 1. \quad (2.21)$$

И окончательно среднее $\langle A \rangle$ можно определить как

$$\langle A \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{C_r} \Omega_A(C_r) P(C_r) = \varepsilon \{ \Omega_A(C_r) \}. \quad (2.22)$$

Правила построения стохастической процедуры, технические детали и более подробное изложение можно найти в [82, 84, 85]. В настоящее время все еще прилагаются значительные усилия для развития квантовых методов МК, пригодных для изучения систем с произвольным значением спина [67, 70, 71, 88–90].

3. Исследования фазовых переходов и статических критических явлений в модельных системах

Исследование различных моделей, описывающих фазовые переходы методами МК, почти всегда сопровождалось попытками изучить непосредственно критическую область с расчетом КИ и КА [15, 16, 91–93]. Однако в ранних работах практически все исследования такого рода носили качественный характер. Определить T_c и другие критические параметры с большой точностью для моделируемых систем с конечными размерами было довольно сложно. Ситуация, по-видимому, изменилась с тех пор как К. Биндер предложил использовать для определения T_c и характера ФП кумулянты U_L четвертого порядка [94, 95]

$$U_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (3.1)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}, \quad (3.2)$$

где E — энергия систем с линейными размерами L и M — намагниченность.

Выражения (3.1) и (3.2) позволяют определить T_c с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Для переходов первого

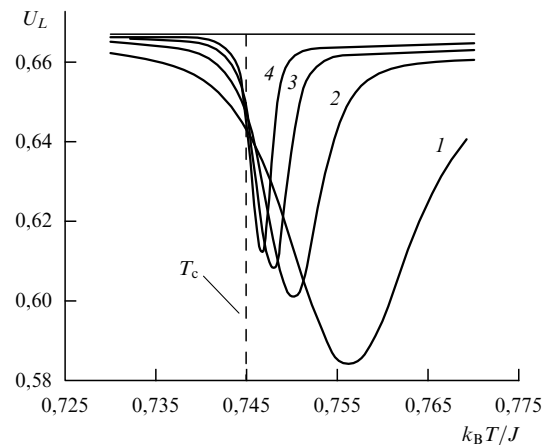


Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера U_L для фазового перехода первого рода от температуры для $2d$ модели Поттса с $q = 8$ состояниями: 1 — $L = 16$; 2 — $L = 24$; 3 — $L = 32$; 4 — $L = 40$ [130].

рода величина U_L стремится к некоторому нетривиальному значению. Для переходов второго рода можно построить зависимости U_L от температуры для разных значений L и определить T_c из общей точки пересечения этих кривых. Теория конечно-размерного масштабирования подразумевает существование такой точки [12, 16, 96] (более подробно идеи конечно-размерного масштабирования рассмотрены в разделе 5). Характерные зависимости U_L от температуры показаны на рис. 3 и рис. 4 (на рис. 4 и далее погрешность всех величин, представленных на графиках, имеет величину, равную размерам использованных точек). Точность метода кумулянтов достаточно высока, хотя и требует значительных вычислительных мощностей и тщательного анализа данных. Он может быть применен к разнообразным моделям, таким, как модель Изинга и Гейзенберга [94–98], Поттса [99], XY-модели [100], в том числе и к спиновым стеклам [101] и использовался в большинстве последующих работ.

Следующим крупным шагом в этом направлении явилась разработка высокоэффективных кластерных алгоритмов метода МК, специально разработанных для исследования критической области и гистограммных методов анализа данных [37–40]. Все эти разработки в сочетании с теорией конечно-размерного скейлинга

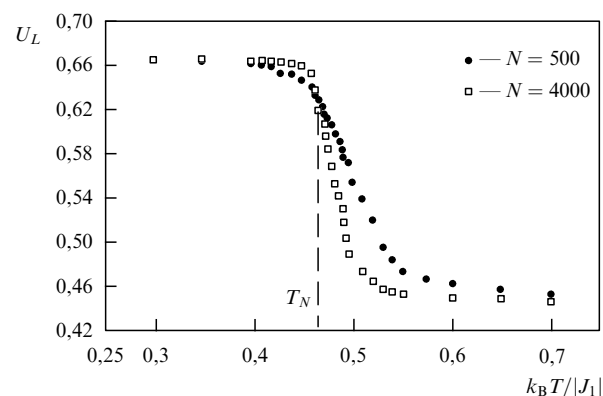


Рис. 4. Зависимость кумулянта Биндера U_L для фазового перехода второго рода от температуры для модели антиферромагнетика Cr_2O_3 .

позволили получать методом МК результаты, которые по своей точности не уступают лучшим данным других методов (см. рис. 1 и 2).

Подробное исследование модели Изинга на квадратной и простой кубической (ПК) решетке было выполнено еще в 70-е годы [92, 93]. В последующие годы акцент сместился в сторону изучения более реалистичных моделей со сложными типами взаимодействий и на других классах решеток, в том числе и экзотических. Например, модель Изинга с трехспиновым взаимодействием изучалась в [102], с четырехспиновым — в [103], в случайных полях — в [104–107], с биквадратным взаимодействием — в [108], в поперечном поле — в [109], в сильных магнитных полях — в [110], в разбавленных системах — в [111], с анизотропией — в [112], в антиферромагнитных системах — в [113, 114], с фрустрацией — в [115], с учетом взаимодействия между более далекими соседями — в [116–118], на квазирешетках — в [119, 120].

Статические свойства модели Гейзенберга и ее различных вариантов изучены в работах [121–129]. Модель Поттса исследована в [130–133]. Методом МК интенсивно изучаются и XY-, XXZ-, XYZ-модели на решетках разной пространственной размерности [134–141].

В последние годы, по-видимому, методу МК принадлежит решающая роль в определении принадлежности той или иной модели к соответствующему классу универсальности и в проверке справедливости гипотезы универсальности для различных моделей.

Рассмотрим некоторые наиболее интересные, с нашей точки зрения, результаты, полученные на моделях.

В [119] исследована $2d$ ферромагнитная модель Изинга на квазипериодической октогонально сложенной решетке со свободными границами ($L \times L = N$, $185 \leq N \leq 5497$). Полученное методом МК значение T_c заметно выше ($k_B T_c / J = 2,39 \pm 0,01$), чем у классической двумерной модели Изинга на квадратной решетке ($k_B T_c / J = 2,269$), хотя координационное число у обеих решеток одно и то же и равно $n = 4$. Критические индексы ν , β , γ согласуются с данными, полученными на квазирешетке с осью симметрии пятого порядка (решетка Пенроуз (Penrose)). Тщательные исследования на данной решетке показали, что конечно-размерный скейлинг хорошо описывает квазирешетки со свободными границами, исходя из чего, можно заключить, что квазирешеточные $2d$ модели Изинга без фрустраций со свободными границами принадлежат к тому же классу универсальности, что и $2d$ модели Изинга с периодическими граничными условиями (ПГУ). Кроме того, авторы в [119] без принципиальных трудностей вычислили γ и ν , а при определении β столкнулись со значительными трудностями, связанными с его малостью. Обращает на себя внимание и тот факт, что T_c в октогонально сложенной квазирешетке и в квазирешетке Пенроуз выше, чем в бесконечной квадратной решетке. Но численный эксперимент пока не позволил определить, совпадают ли T_c у первых двух типов квазирешеток.

Так, в работе [120] исследована модель Изинга на $2d$ случайной решетке с числом спинов $N = 5000, 10000, 20000, 40000, 80000$. Основная цель работы — проверить справедливость гипотезы универсальности для случайных решеток. Предыдущие попытки получить ответ не прояснили ситуацию [142–145]. Заметим, что стандартный алгоритм метода МК, использованный в некоторых работах [145], требует слишком много машинного вре-

мени в такого рода исследованиях, поэтому с конца 80-х годов все чаще используются кластерные алгоритмы. В [120] МК исследования выполнены с использованием такого алгоритма. Наиболее вероятное координационное число на такой решетке $n = 6$ такое же, как в регулярной треугольной решетке. Значение $K_c = J/k_B T_c = 0,2630 \pm 0,0002$, полученное авторами на основе расчета кумулянта Биндера, хорошо согласуется со значением, полученным из высокотемпературных разложений (ВР) [145], и этот результат очень близок к соответствующему значению для регулярной треугольной решетки $K_c = \ln(3/4) = 0,27465$. Полученные значения критических индексов ν , β/ν , γ/ν , γ убедительно доказывают принадлежность $2d$ модели Изинга на случайной решетке к тому же классу универсальности, что и модель Изинга на регулярной $2d$ решетке.

Обширные исследования модели Изинга со случайными полями на ПК решетке с размерами $L \times L \times L$ ($4 \leq L \leq 32$) выполнены в [107]. С использованием конечно-размерного скейлинга и кластерного алгоритма метода МК рассчитаны КИ ν , β , γ и критические температуры как функции случайного поля h . Выполнено сопоставление значений КИ с данными, полученными другими методами (стандартный метод МК, метод высокотемпературных разложений, РГ), и отмечена более высокая точность данных, полученных кластерным методом МК.

Отметим одну интересную особенность, найденную на $2d$ квадратной решетке полностью фрустрированной XY-модели методом МК в [137]. В этой работе в результате исследования решеток размеров до $L \times L = 240 \times 240$ вычислены критические индексы ($\nu = 0,3069$, $\eta = 0,1915$) и обнаружено, что эта модель относится к новому классу универсальности, отличной от обычной XY-модели и классической модели Изинга на $2d$ решетке. В то же время сами авторы обращают внимание на то, что результаты желательнее уточнить более тщательными исследованиями.

По-видимому, наиболее точные значения критических параметров трехмерной модели Изинга на ПК решетке с использованием классической схемы метода МК получены в [146]. С применением гистограммных методов анализа данных и специальных многоспиновых алгоритмов кодирования были исследованы критические свойства модели Изинга на решетках с размерами $8 \leq L \leq 96$. Полученные значения критических параметров представлены в табл. 1 в сравнении как с общепринятыми [6, 7], так и с наиболее свежими данными [8], рассчитанными на основе подходов теории поля.

Таблица 1. Значения критических параметров для $3d$ модели Изинга

Критический параметр	Теория поля		Метод Монте-Карло Алгоритм Метрополиса [146]
	[6, 7]	[8]	
K_c	—	—	0,2216595(26)
ν	0,6305(25)	0,631	0,6289(8)
α	0,108(9)	0,107	0,113*
β	0,3265(25)	0,327	0,3258(44)
γ	1,239(4)	1,239	1,2390(71)
η	0,037(3)	0,038	—
δ	4,795(17)	4,7889*	4,8029*

* Значения рассчитаны из соотношений $\alpha + d\nu = 2$ и $\delta = 1 + \gamma/\beta$.

Имеется ряд высокоточных исследований методом МК классической модели Гейзенберга [128]

$$H = -J \sum_{\substack{ij \\ i < j}} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (3.3)$$

где $J > 0$ — параметр обменного взаимодействия $|S_i| = 1$. Исследования проведены на ПК решетке $L \times L \times L$ с размерами и $6 \leq L \leq 24$. С использованием конечно-размерного скейлинга и оптимизированного гистограммного метода анализа данных [39, 40] с большой точностью рассчитаны статические критические индексы α , β , γ , ν . А в работе [147] исследована модель (3.3) на ПК и ОЦК решетках с размерами вплоть до $L = 40$. Рассчитаны различные термодинамические величины как функции температуры вблизи T_c . Показано, что хотя критические температуры для ПК $K_c = 0,693035(37)$ и ОЦК $K_c = 0,486798(12)$ решеток имеют разные значения, КИ для обоих типов решеток хорошо согласуются друг с другом. Аналогичные исследования выполнены и в [148] с проверкой ожидаемого эффекта от использования кластерного алгоритма на ПК решетке с $L \leq 48$. Выполнен тщательный гистограммный анализ данных и с использованием конечно-размерного скейлинга вычислены ν , α , β , γ , η . Полученные в этих работах значения КИ находятся в превосходном согласии как между собой, так и с данными метода РГ и ϵ -разложения и представлены в табл. 2. Авторы [148] исследовали также пространственные корреляции и восприимчивость в высокотемпературной фазе на решетках с размерами до $L = 100$. Из результатов моделирования следует, что оценки для ν , γ при этом можно извлекать прямо из МК данных по степенным зависимостям, не привлекая другие методы анализа. Если это так, то, учитывая темпы развития вычислительных мощностей современных компьютеров, можно ожидать, что в скором времени появится возможность рассчитывать критические параметры непосредственно из МК экспериментов, не используя при этом многочисленные "хитрости" и технические приемы. В разделе 5 будет показано, что некоторые критические параметры для антиферромагнитных моделей можно извлекать этим способом на системах значительно меньших размеров.

Таблица 2. Значения критических параметров для $3d$ модели Гейзенберга

Критический параметр	Теория поля		Метод Монте-Карло	
	[6, 7]	[8]	Алгоритм Метрополиса [128]	Кластерные алгоритмы
K_c	—	—	0,6299(1)	0,693035(37) [147] 0,6930(1) [148]
ν	0,710(7)	0,706	0,706(9)	0,7048(30) [147] 0,704(6) [148]
α	-0,130(21) -0,115(9)	-0,117	-0,118(27)	-0,1144(90) [147] -0,112(18) [148]
β	0,368(4)	0,366	0,364(7)	0,3639(35) [147] 0,362(4) [148]
γ	1,390(10)	1,386	1,390(23)	1,3873(89) [147] 1,389(14) [148]
η	0,033(4)	0,038	0,031(7)	0,027(2) [148]
δ	4,777(14)	4,8187*	4,819	—

* Значения рассчитаны из соотношений $\alpha + d\nu = 2$ и $\delta = 1 + \gamma/\beta$.

Очень интересными представляются результаты МК исследований фрустрированных моделей. Вообще, вопрос о существовании нового кирального класса универсальности для фрустрированных спиновых систем на многих решетках, в частности, треугольных, является дискуссионным [149]. В [150, 151] предполагается, что критическое поведение фрустрированной антиферромагнитной XY-модели и модели Гейзенберга на гексагональной решетке описывается новым классом универсальности со следующими индексами для $n = 3$ (модель Гейзенберга):

$$\alpha = 0,24(8), \beta = 0,30(2), \gamma = 1,17(7), \nu = 0,59(2), \\ \beta_k = 0,55(4), \gamma_k = 0,72(8), \nu_k = 0,60(3)$$

(k означает киральность). С этой точки зрения интересны данные, полученные в [149] для фрустрированной модели Гейзенберга на гексагональной решетке с размерами $12 \leq L \leq 36$. Авторы обнаружили, что температуры магнитного и кирального упорядочений в пределах погрешности совпадают: $T_c = T_k = 0,9577(2)$; но физические причины такого совпадения им пока неизвестны. На основе расчетов кумулянта Биндера установлен непрерывный характер ФП в этой модели. Рассчитаны КИ β , γ , ν , β_k , γ_k , ν_k , при этом установлено, что хотя $T_c = T_k$, индексы ν и ν_k не совпадают, что означает разные характеры роста магнитных и киральных корреляций. Значения КИ, полученные в этой работе, свидетельствуют в пользу предположения о наличии нового класса универсальности, в то же время сами авторы считают необходимым провести дополнительные и более тщательные исследования для окончательного решения вопроса.

Отметим еще одну интересную работу [152], где исследована модель жидкости с гейзенберговскими спином и взаимодействием. В такой жидкости наблюдается ФП порядок-беспорядок при изменении температуры и фиксированном значении плотности "частиц-спинов". С использованием теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны температуры ФП и КИ при разных значениях концентрации спинов. Установлено, что индексы β/ν , γ/ν , $1/\nu$ для всех концентраций ($p = 0,4; 0,6; 0,7$) одинаковы и отличаются от значений для решеточной модели Гейзенберга.

4. Фазовые переходы и критические явления в квантовых решеточных системах

В этом разделе мы рассмотрим строгие результаты, полученные квантовым методом МК на основе подхода Хэндскомба. После того как этот метод был применен для изучения ферромагнитной модели Гейзенберга в начале 60-х годов [72, 73], он довольно долгое время оставался невостребованным. По-видимому, дальнейшее его использование началось в работах [74, 75]. В [74] исследованы одномерные ферромагнитные и антиферромагнитные системы и трехмерная ферромагнитная модель Гейзенберга со спином $S = 1/2$. Вычисленные значения восприимчивости, теплоемкости и энергии хорошо согласуются с данными ВР. В [75] не только вычислены некоторые критические индексы классической цепочки Гейзенберга (например, $\gamma = 1,75$), но и показано, что этот подход можно использовать и в низкотемпературной области вплоть до $k_B T/J = 0,025$, где

подход, основанный на формуле Троттера, сталкивается с большими трудностями. Интерес к такого рода исследованиям вызван еще и тем, что вопрос о низкотемпературном поведении одномерной ферромагнитной гейзенберговской цепочки вызвал оживленную дискуссию [153] и квантовый метод МК позволил прояснить при этом многие моменты. Для индекса восприимчивости γ ($\chi \sim \varepsilon^{-\gamma}$ при $T \rightarrow 0$) различные методы дают большой разброс значений: $\gamma \sim 1,3-2,0$; и, по-видимому, наиболее надежный результат ($\gamma = 2,0$) получен на основе "анзатца" Бете [154]. Но в этом подходе используется сложная вычислительная процедура: необходимо с высокой степенью точности решать большие системы нелинейных интегральных уравнений и проводить двойную экстраполяцию результатов ($N \rightarrow \infty$ и параметр анизотропии $D \rightarrow 1$). Значение индекса в [154] на самом деле не превышает 1,9; вывод о $\gamma = 2$ делается на основе еще одной экстраполяции к $T = 0$. Ранние исследования квантовым методом МК тоже приводили к противоречивым результатам ($\gamma \approx 1,3$, $\gamma \approx 1,55$ [153]; $\gamma \approx 1,75$ [75]), что, скорее всего, было связано с небольшим числом спинов и недостаточно низкими температурами, исследованными при расчетах ($N \leq 200$, $T \geq 0,025$). Например, в [75] $N = 128$ и $T = 0,025$. Для выяснения этих вопросов в [81] проводились исследования с более крупными ячейками МК с числом спинов $N = 100, 200, 300, 500$ и при еще более низких температурах ($0,01 \leq k_B T/J \leq 0,1$). При каждой температуре достигалось насыщение по N , т.е. дальнейшее ее увеличение не изменяло восприимчивости; длина марковских цепей составляла 5000 МКшагов/спин. Индекс восприимчивости $\gamma_{\text{эф}}$ определялся дифференцированием зависимости $\ln \chi$ от T . Экстраполяция МК данных к $T \rightarrow 0$ приводит к значению $\gamma \approx 2,0$, что хорошо согласуется с результатами, полученными на основе "анзатца" Бете [154].

В [80, 82] проведено обобщение этого метода на модель Изинга в поперечном поле с произвольными дальнедействующими потенциалами J/N . Здесь же приводятся результаты исследования этой модели в сравнении с теорией МП и стандартным методом МК. В [80] этот подход впервые применен и к модели Гейзенберга ($d = 1$, $S = 1/2$, $N = 51$) с дальнедействующим потенциалом $J \sim r^{-3}$. Низкотемпературные данные были использованы для оценки восприимчивости ($T \rightarrow 0$) $\gamma = 1,70 \pm 0,05$, и это значение в пределах погрешности согласуется с найденным в [75].

Квантовый метод МК, основанный на подходе Хэндскамба, оказался полезным при исследовании ФП и первого, и второго рода, он также допускает изучение гамильтонианов с многоспиновыми взаимодействиями. Такого рода исследования выполнены в работе [83], в которой изучена квантовая модель Гейзенберга ($S = 1/2$) на ПК решетке с гамильтонианом

$$\hat{H} = - \sum_{s>p} 2J_{sp}(\hat{S}_s \hat{S}_p) - \sum_{k,l,m,n} 2K_{klmn}(\hat{S}_k \hat{S}_l)(\hat{S}_m \hat{S}_n), \quad (4.1)$$

где $J_{sp} = J > 0$ и суммирование в первом слагаемом ведется по ближайшим соседям, во втором слагаемом обменные константы K_{klmn} отличны от нуля ($K_{klmn} = K > 0$) в том случае, если узлы k, l, m, n образуют на решетке элементарный квадрат.

Интерес к подобного рода системам обусловлен рядом причин: многоспиновые взаимодействия учиты-

вают в первом приближении колебания решетки и, к тому же, имеется ряд реальных магнетиков, в которых многоспиновые взаимодействия играют решающую роль [155, 156].

Модели с гамильтонианом, подобным (4.1), рассматривались и ранее — в приближении теории молекулярного поля (МП) [155] и методом функций Грина (ФГ) [154]. Оба эти метода в применении к гамильтониану (4.1) являются приближенными, метод МП предсказывает, например, для ФП второго рода независимость T_c от $\Delta = K/J$, различные схемы расщепления в методе функций Грина приводят к трудно контролируемой погрешности [155].

Обобщение квантового метода МК на случай учета многоспинового обмена в гамильтониане выполнено в [84]. На основе этого обобщения в [83] исследованы системы (4.1) на ПК решетке с ПГУ ($N_{\text{эф}} \rightarrow \infty$) из $N = L \times L \times L$ спинов ($L = 8, 12, 16$). Вычисления проведены для $\Delta = K/J = 0; 0,5; 0,75; 1,0$. Обобщение метода МК на случай учета многоспинового обмена выполнено без приближений, поэтому для оценки точности метода при $\Delta > 0$ можно использовать случай $\Delta = 0$, для которого имеются достаточно строгие данные метода высокотемпературных разложений десятого порядка [157]. При $\Delta = 0$ в системе происходит ФП второго рода. Представленные в [83] данные по температурной зависимости энергии хорошо согласуются с данными метода ВР. Критические температуры, определенные методами МК и ВР, в пределах погрешности также совпадают [157]:

$$T_c^{\text{МК}} = k_B T/J = 1,67 \pm 0,03, \quad T_c^{\text{ВР}} = 1,68 \pm 0,01,$$

тогда как теория МП и метод ФГ дают следующие значения:

$$T_c^{\text{МП}} = 3,0, \quad T_c^{\text{ФГ}} = 2,4 \pm 0,2.$$

Согласно методам МП и ФГ при $\Delta > \Delta_0$ ФП второго рода сменяются переходами первого рода ($\Delta_0^{\text{МП}} = 0,33$, $\Delta_0^{\text{ФГ}} = 0,5$ [154]). Отметим, что исследованные в этой работе ФП первого рода квантовым методом МК ранее не изучались, поэтому остановимся на этом более подробно. При значениях $\Delta = 0; 0,5$ зависимость энергии по температуре имеет гладкий вид. Однако при $\Delta = 1,0$ эта зависимость имеет разрывный характер, хотя величина разрыва невелика, что свидетельствует о ФП первого рода, близком к ФП второго рода. При такой картине ФП в конечных системах происходят скачки между двумя фазами и осуществляется усреднение данных (рис. 5). О наличии двух ветвей в зависимости энергии свидетельствует распределение вдоль марковской цепи, при $\Delta = 1$ оно имеет бимодальный характер (рис. 6в). При ФП второго рода ($\Delta = 0; 0,5$) распределение энергии имеет гауссов характер (рис. 6б).

На рисунке 5 показаны намагниченности для конечных систем из $N = 512$, $N = 4096$ и данные экстраполяции к $N = \infty$. Как видно из рисунка, при $N = \infty$ в поведении намагниченности также наблюдается разрыв. По оценкам, значение $\Delta_0 \approx 0,75$ является границей, разделяющей ФП первого и второго рода [83]. Фазовые диаграммы модели представлены на рис. 6а в сравнении с приближениями теории МП и ФГ. Очевидно, что данные этих методов значительно отличаются от МК результатов, и оба эти метода приводят в данной задаче к большим

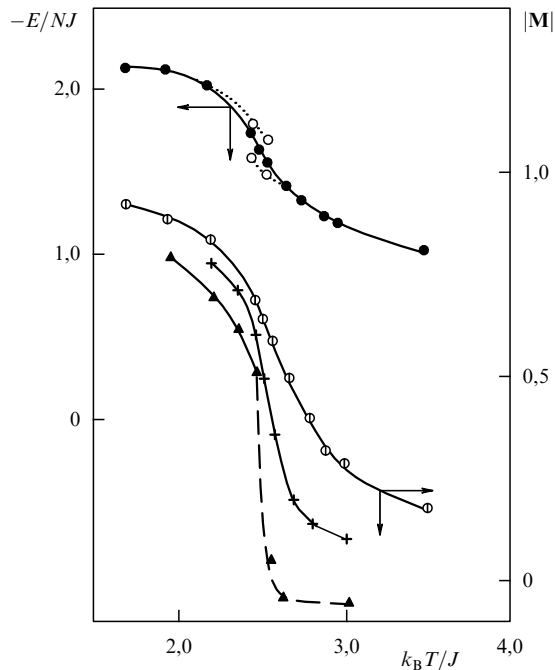


Рис. 5. Температурные зависимости энергии и намагниченности при $\Delta = K/J = 1$. Энергия ($N = 512$): ● — среднее по всей марковской цепи; ○ — данные, полученные по положению максимумов бимодального распределения энергии. Намагниченность: ○ — $N = 512$; + — $N = 4096$; ▲ — $N = \infty$ [83].

ошибкам. Эти результаты, по-видимому, свидетельствуют о том, что разработан сравнительно эффективный вариант квантового метода МК, позволяющий учитывать многоспиновый обмен в изотропной модели Гейзенберга.

Достаточно эффективным методом исследования магнитных систем с многоспиновым взаимодействием показал себя и квантовый метод МК, основанный на

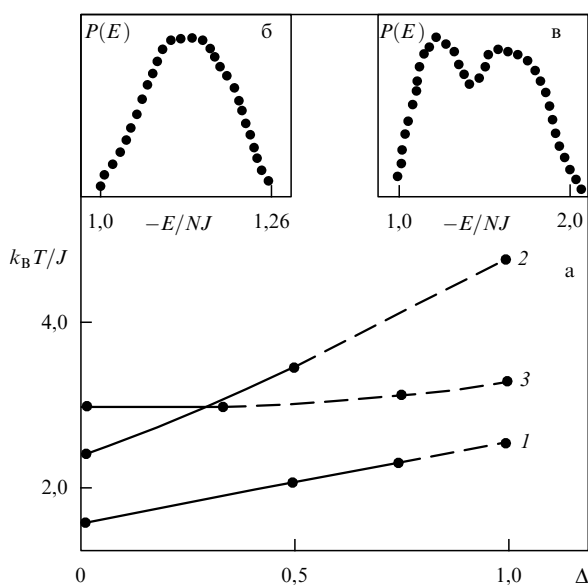


Рис. 6. Фазовая диаграмма (а): 1 — метод МК; 2 — метод ФГ; 3 — метод МП. Сплошные линии соответствуют переходам второго рода, штриховые — первого. Распределения энергии даны в условных единицах; (б) $\Delta = 0$, (в) $\Delta = 1$ [83].

преобразовании Троттера (2.11) [47–52, 158]. Так, в работах С.С. Аплеснина [63, 64] исследованы тепловые и магнитные свойства, рассчитаны парные и четырехспиновые корреляционные функции одномерной антиферромагнитной цепочки с четырехспиновым обменом и спином $S = 1/2$. Показано, что такое взаимодействие приводит к димеризации одномерной антиферромагнитной цепочки и фазовый переход димерное состояние–парамагнетик является фазовым переходом второго рода. Этим же методом исследован и анизотропный антиферромагнетик с четырехспиновым взаимодействием со спином $S = 1/2$ на квадратной решетке. Классическая модель Гейзенберга с анизотропным билинейным и четырехспиновым обменом стандартным методом МК изучена в [159].

5. Исследование фазовых переходов и критических явлений в моделях реальных магнитных материалов

5.1. Критические явления

в малых магнитных частицах

Как мы уже отмечали, при исследовании ФП и КЯ методами ЧЭ до сих пор основное внимание уделялось хорошо известным ферромагнитным моделям со взаимодействием между ближайшими соседями. В основном такие модели, как правило, являются моделями первого приближения и многие черты реальных систем не учитывают.

В этом разделе мы рассмотрим результаты, которые получены при изучении моделей реальных магнитных материалов методами МК. Такие модели призваны учесть особенности систем, которые не учитываются в простейших моделях, но существуют в реальных кристаллах и оказывают значительное влияние на характер критического поведения и свойства систем вблизи T_c .

В работах [129, 160–163] предложены модели реальных антиферромагнетиков $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, Cr_2O_3 , V_2O_3 и методом МК изучены их основные статические магнитные и тепловые свойства, а методом МД — динамические свойства на коротких временах. В этих работах выявлены и исследованы закономерности и процессы, связанные с влиянием на различные свойства малых магнитных частиц и систем с ПГУ ($N_{\text{эф}} \rightarrow \infty$) температуры, внешнего магнитного поля, формы частицы, числа взаимодействующих элементов и некоторых других факторов.

Особенности критического поведения моделей сложных реальных систем до сих пор не были детально изучены. Здесь мы несколько более подробно остановимся на результатах, полученных авторами этого обзора при исследовании критического поведения модели антиферромагнетика Cr_2O_3 . Мы рассмотрим особенности критического поведения как малых магнитных частиц Cr_2O_3 , так и систем с ПГУ.

В последнее время значительно возрос интерес к свойствам малых систем не только из-за значительных перспектив их практического применения [164–173], но и в связи с тем, что малые частицы (кластеры) являются мезоскопическими объектами, т.е. их можно рассматривать как промежуточное звено между классическим макромиром и квантовым микромиром [174–180]. Несмотря на большое количество исследований различ-

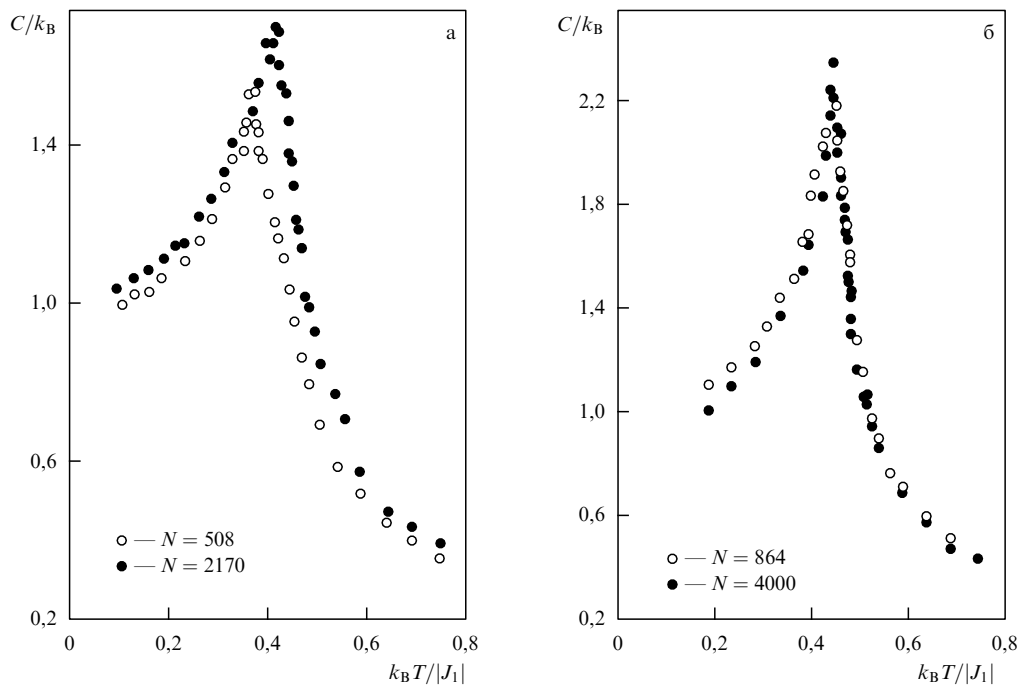


Рис. 7. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_1|$ в модели Sr_2O_3 : (а) малые магнитные частицы [185]; (б) системы с ПГУ (модель I).

ных свойств малых частиц их критические свойства до сих пор практически не изучены.

В наших исследованиях моделей малых магнитных частиц все кристаллографические, обменные и другие величины, использованные при МК расчетах, соответствуют реальным образцам Sr_2O_3 и взяты из экспериментальных исследований.

Гамильтониан системы может быть представлен в следующем виде [160]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1(\boldsymbol{\mu}_i \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{1}{2} \sum_{k,l} J_2(\boldsymbol{\mu}_k \boldsymbol{\mu}_l) - D_0 \sum_i (\boldsymbol{\mu}_i^z)^2, \quad |\boldsymbol{\mu}_i| = 1. \quad (5.1)$$

Согласно данным по рассеянию нейтронов и теории спиновых волн, представленных в работе [181], J_1 — параметр взаимодействия каждого спина с одним ближайшим соседом на расстоянии $r_{ij} = 2,65 \text{ \AA}$ и J_2 — с тремя следующими соседями на расстоянии $r_{ij} = 2,89 \text{ \AA}$ ($J_2 = 0,45 J_1, J_1 < 0, J_2 < 0$). Константы взаимодействия с более далекими соседями в Sr_2O_3 значительно меньше, и они не учитываются. Ось Z совпадает с направлением пространственной диагонали ромбоэдрической ячейки [111]. Релятивистские взаимодействия различного рода аппроксимировались эффективной одноионной анизотропией $D_0 > 0$ [182, 183]. Соотношение между анизотропией и обменом полагалось равным $D_0/|J_1| = 0,025$.

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 с длиной до 10×10^4 МКшагов/спин. Для вывода системы в равновесное состояние в зависимости от близости к

критической области отсекался неравновесный участок, состоящий из $(5-20) \times 10^3$ МКшагов/спин. Обычно при исследовании критических явлений методами МК стараются уменьшить степень влияния свободной поверхности, и на систему накладываются различные типы ПГУ [10]. В этой части нашего исследования мы рассматриваем системы как с открытыми поверхностями, так и с ПГУ. Вопросы, связанные с магнитными свойствами [165, 172, 173] и критическими явлениями в малых частицах [165], а также зависимость КИ и КА от наличия определенной доли поверхностных спинов, находящихся в несколько иных условиях, нежели объемные, представляют и определенный самостоятельный интерес [184]. Для изучаемых частиц доля поверхностных спинов менялась от 46,8% для самой маленькой, до 22,8% для частицы с $N = 2502$. Поскольку общее количество поверхностных спинов в частицах достаточно большое, их влияние на различные термодинамические параметры должно быть существенным. Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались выражения [128]

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5.2)$$

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (5.3)$$

где $K = |J_1|/k_B T$; N — число частиц; U — внутренняя энергия; m — подрешеточная намагниченность.

Температурные зависимости C и χ дают хорошо выраженные максимумы в критической области. Известно, что T_N для малых систем смещается в сторону более низких температур по сравнению с "макросистемами". В наших экспериментах также наблюдается четко выраженное смещение максимума C и χ с изменением N (рис. 7а и 8а) [185–187], что свидетельствует о росте температуры "фазового перехода" с увеличением числа спинов в частице.

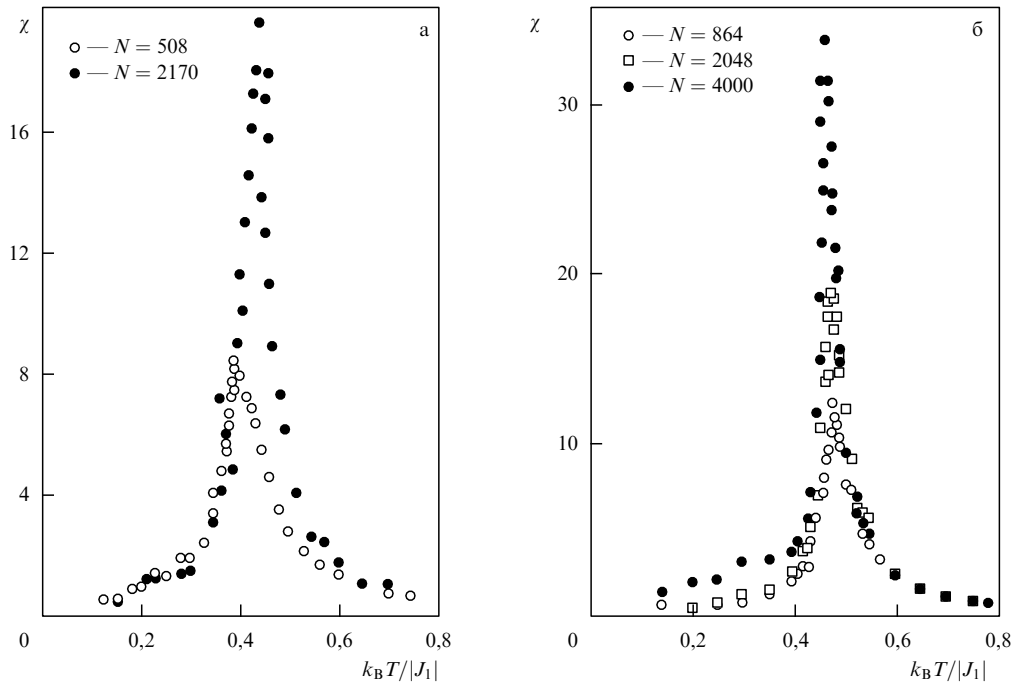


Рис. 8. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J_1|$ в модели Cr_2O_3 : (а) малые магнитные частицы [185]; (б) системы с ПГУ (модель I).

Для аппроксимации критического поведения теплоемкости использовались выражения [188–191]

$$C = \frac{A}{\alpha} |\varepsilon|^{-\alpha} (1 + D_c |\varepsilon|^x), \quad (5.4)$$

$$C = \frac{A}{\alpha} (|\varepsilon|^{-\alpha} - 1) + D_c |\varepsilon|^x, \quad (5.5)$$

где $\varepsilon = |T - T_c| / T_c$; A — критическая амплитуда; D_c — амплитуда коррекции к скейлингу; $x = 0,55$, что соответствует модели Гейзенберга [6, 7].

Обработка данных метода МК проводилась нелинейным методом наименьших квадратов. В качестве оптимальных α , A и D_c принимались значения, минимизирующие сумму среднеквадратичных отклонений. Результаты аппроксимации данных как на основе выражения (5.4), так и выражения (5.5) достаточно хорошо согласуются между собой. Но предпочтение нами было отдано выражению (5.5), так как оно обеспечивало меньшую погрешность для наших данных.

Полученные данные для α и A представлены в табл. 3 [185]. Все значения α при $T > T_N$ имеют отрицательный знак, характерный для гейзенберговского критического поведения; они несколько меньше, чем теоретическое

$\alpha = -0,126(28)$, полученное для изотропной модели Гейзенберга с короткодействующими силами [6–8] и практически не зависят от размеров частиц. Значения A' для $T < T_N$ получены при обработке данных исходя из предположения, что $\alpha' = \alpha$ в соответствии с предсказаниями статического скейлинга [1, 2]. Соотношения между критическими амплитудами A и A' , определенные по указанной схеме для всех частиц, лежат в пределах $0,95 \leq A/A' \leq 1,10$. Значения критического индекса α для Cr_2O_3 , определенные из данных лабораторных экспериментов, весьма противоречивы и меняются в пределах от $\alpha = 0,14$ до $\alpha = -0,12$ [189, 190] в зависимости от метода исследования, интервала изменения ε , выбора T_N и некоторых других параметров.

Следует отметить, что поскольку в гамильтониане (5.1) имеется член, описывающий одноионную анизотропию, то в критическом поведении Cr_2O_3 должен наблюдаться кроссовер от гейзенберговского критического поведения к изинговскому [2, 191]. При наших расчетных данных температура кроссовера $\varepsilon = (D_0/J)^{1/f}$, где $f = 1,25$ при кроссовере от $n = 3$ к $n = 1$ (n — число компонент параметра порядка) составляет $\varepsilon_{\text{cr}} \approx 0,052$. Но значения α , полученные нами в диапазоне температур $5 \times 10^{-3} \leq \varepsilon \leq 7,5 \times 10^{-1}$, не показывают наличия кроссовера. Возможно, это связано с тем, что поверхностные спины в частицах Cr_2O_3 , как было ранее нами установлено [160], даже при температурах значительно ниже T_N свободно переориентируются. Такое их поведение расширяет область с гейзенберговским критическим поведением и приводит к смещению температуры кроссовера ε_{cr} к точке Нееля. Следовательно, рассмотренная нами область приведенных температур может целиком соответствовать гейзенберговскому критическому поведению.

Несколько меньшие значения α , чем предсказывает теория [6–8] и лабораторные эксперименты [189, 190], по-видимому, также связаны с наличием значительной доли

Таблица 3. Эффективные значения критического индекса α и критических амплитуд A и A' для малых магнитных частиц ($\alpha' = \alpha$)

N	$5 \times 10^{-3} \leq \varepsilon \leq 7,5 \times 10^{-1}$			$2,5 \times 10^{-2} \leq \varepsilon \leq 7,5 \times 10^{-1}$		
	α	A	A'	α'	A	A'
286	-0,20(3)	0,61	0,61	-0,19(3)	0,60	0,59
508	-0,18	0,57	0,55	-0,17	0,56	0,56
760	-0,20	0,67	0,67	-0,20	0,65	0,66
908	-0,17	0,57	0,58	-0,16	0,55	0,57
1602	-0,19	0,66	0,60	-0,19	0,64	0,59
2170	-0,17	0,61	0,64	-0,17	0,60	0,63
2502	-0,21	0,63	0,68	-0,20	0,62	0,67

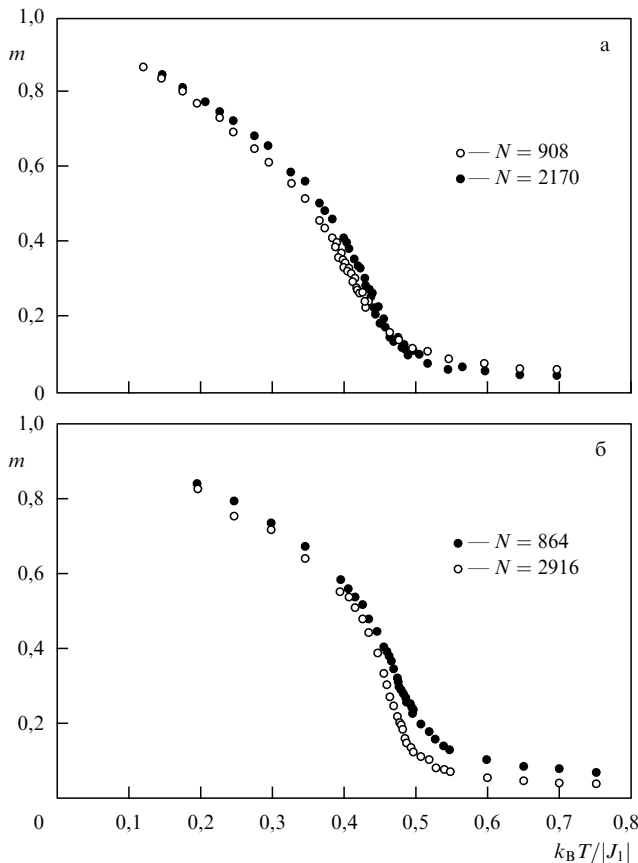


Рис. 9. Зависимость подрешеточной намагниченности m от температуры $k_B T / |J_1|$ в модели Cr_2O_3 : (а) малые магнитные частицы [185]; (б) системы с ПГУ (модель I).

(22,8–46,8%) слабо закрепленных поверхностных спинов. Отметим, что при обработке данных в низкотемпературной фазе $T < T_N$ без учета скейлингового предположения $\alpha' = \alpha$ в рассмотренных нами температурных интервалах для всех частиц $\alpha' \approx 0,03(3)$. Соотношение между A и A' лежит при этом в интервале $2,0 \leq A/A' \leq 5,0$.

Для более подробного выяснения особенностей критического поведения частиц следует рассмотреть зависи-

Таблица 4. Эффективные значения критического индекса β для малых магнитных частиц ($\varepsilon_{\min} \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{\max}$, $\varepsilon_{\max} = 0,75$)

N	$a_m = 0$				$a_m \neq 0$		
	ε_{\min}				ε_{\min}		
	5×10^{-3}	1×10^{-2}	3×10^{-2}	8×10^{-2}	1×10^{-2}	3×10^{-2}	8×10^{-2}
286	0,18	0,21	0,26	0,31	—	—	—
508	0,22	0,25	0,29	0,32	0,23	0,28	0,34
760	0,25	0,27	0,30	0,33	0,25	0,30	0,36
908	0,25	0,31	0,32	0,36	0,26	0,31	0,38
1602	0,29	0,31	0,33	0,36	0,28	0,32	0,38
2170	0,33	0,37	0,39	0,41	0,30	0,35	0,39
2502	0,33	0,37	0,40	0,43	0,30	0,34	0,40

мость подрешеточной намагниченности m и восприимчивости χ от температуры. Сразу заметим, что эти величины являются неудобными для исследования методом МК, так как вблизи T_N m имеет высокотемпературные "хвосты", а χ представляет собой сильно флуктуирующую величину.

Температурные зависимости подрешеточной намагниченности для двух частиц $N = 508$ и $N = 2170$ показаны на рис. 9а. Отметим характерные для МК результаты остаточные значения намагниченности, которые с ростом N заметно уменьшаются.

Для аппроксимации критического поведения подрешеточной намагниченности m использовалось выражение

$$m = B|\varepsilon|^\beta(1 + a_m|\varepsilon|^x), \tag{5.6}$$

где B , a_m — критическая амплитуда и амплитуда коррекции к скейлингу соответственно. В табл. 4 представлены данные для β при $a_m \neq 0$ и $a_m = 0$ в некотором диапазоне температур $\varepsilon_{\min} \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{\max}$. Отметим, что β , в отличие от других рассмотренных нами критических индексов (α и γ), проявляет зависимость от числа спинов в частице. Ее абсолютное значение растет с увеличением N . Для β наблюдается еще одна тенденция: с увеличением ε_{\min} значение β также увеличивается. По-видимому, эти особенности связаны с эффектами ближнего порядка, о которых красноречиво свидетельствуют высокотемпературные "хвосты" намагниченности, показанные на

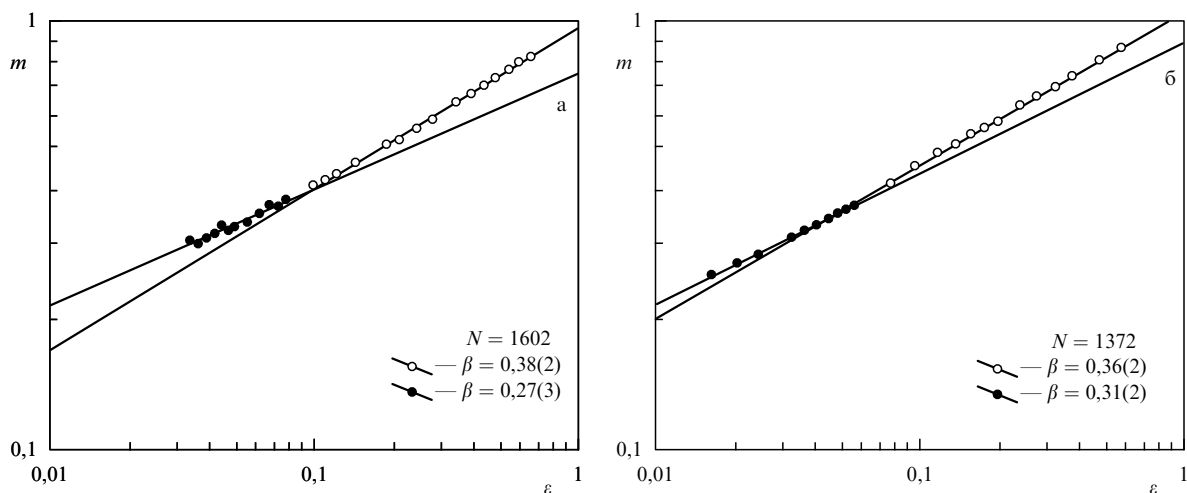


Рис. 10. Двойная логарифмическая зависимость подрешеточной намагниченности m в модели Cr_2O_3 от приведенной температуры ε : (а) для малой магнитной частицы; (б) система с ПГУ (модель I).

рис. 9а. В зависимости t от ε , представленной в двойном логарифмическом масштабе, можно отметить некоторый излом при $\varepsilon_B \approx 0,08$. На рис. 10а показана характерная картина с двумя значениями $\beta \approx 0,27$ при $\varepsilon \leq \varepsilon_B$ и $\beta \approx 0,38$ при $\varepsilon > \varepsilon_B$ для частицы с $N = 1602$. Возможно, что эти данные свидетельствуют о наличии кроссовера от гейзенберговского поведения с $\beta \approx 0,38$ (для модели Гейзенберга $\beta = 0,367$) к изинговскому с $\beta \approx 0,27$ (для модели Изинга $\beta = 0,326$ [6–8]), что не наблюдалось в поведении теплоемкости.

Характерные зависимости восприимчивости от температуры, полученные на основе соотношения (5.3), показаны на рис. 8а. Для обработки этих результатов использовалась простая степенная зависимость

$$\chi = G|\varepsilon|^{-\gamma}, \quad (5.7)$$

где γ , G — критический индекс и критическая амплитуда восприимчивости. В табл. 5 представлены результаты γ , полученные из соотношения (5.7). Значения критических индексов γ и γ' определялись независимо справа и слева от T_N ; T_N определялась по максимуму восприимчивости χ . Для критических индексов γ и γ' так же, как и для α , нет зависимости от числа спинов в частице. Но значения γ и γ' сильно зависят от ε_{\min} и увеличиваются с ростом ε_{\min} . Отметим, что по абсолютным значениям и γ , и γ' трудно судить о критическом поведении восприимчивости как об изинговском ($\gamma = 1,24$) или гейзенберговском ($\gamma = 1,39$).

Таблица 5. Эффективные значения критических индексов γ и γ' для малых магнитных частиц ($\varepsilon_{\max} = 0,75$)

N	γ			γ'		
	ε_{\min}			ε_{\min}		
	4×10^{-2}	8×10^{-2}	1×10^{-1}	4×10^{-2}	8×10^{-2}	1×10^{-1}
508	0,96(3)	1,14(3)	1,22(3)	0,90(3)	1,15(3)	1,33(3)
760	0,94	1,15	1,20	0,93	1,14	1,30
908	1,02	1,14	1,18	0,91	1,22	1,31
1602	1,01	1,15	1,19	0,90	1,21	1,30
2170	1,00	1,13	1,20	0,95	1,20	1,28
2502	0,98	1,13	1,22	0,96	1,18	1,29

5.2. Фазовые переходы и критические явления в "макросистемах"

Рассмотрим особенности критического поведения "макросистем" (систем с ПГУ) Cr_2O_3 . Как известно, в системах с конечными размерами нет истинных фазовых переходов, и наиболее серьезным недостатком компьютерного моделирования ФП и КЯ является то, что при этом приходится иметь дело с конечным числом частиц N . Это приводит к тому, что область фазового пространства, по которому вычисляется статистическая сумма, имеет конечные размеры и термодинамические функции не проявляют сингулярность. Тем не менее конечные системы позволяют воспроизвести многие существенные черты фазовых переходов, и исследование таких псевдопереходов и их особенностей в зависимости от размеров системы дает много ценной информации о ФП в "бесконечных" системах. Особенности ФП и КЯ и возможности метода МК в такого рода исследованиях мы продемонстрируем на моделях антиферромагнетика Cr_2O_3 .

С нашей точки зрения, необходимо рассмотреть следующие значения соотношения между анизотропией D_0 и обменом J_1 в гамильтониане (5.1):

$D_0/|J_1| = 2,5 \times 10^{-4}$ — значение, соответствующее реальным образцам Cr_2O_3 [182, 183];

$D_0/|J_1| = 2,5 \times 10^{-2}$ — значение, характерное для малых магнитных систем с одноосной анизотропией и размерами в несколько десятков ангстрем [192, 193].

В дальнейшем первый случай будем называть *моделью I*, второй — *моделью II*. Все кристаллографические, обменные и другие данные, использованные для модели I, соответствуют реальным образцам Cr_2O_3 . В модели II для константы анизотропии D_0 использовано значение, соответствующее малым магнитным системам (частицам), так как несмотря на наличие периодических граничных условий (ПГУ) моделируемые методом МК системы имеют конечные линейные размеры $L \ll \infty$ ($L \sim N^{1/3}$), вследствие чего возможно проявление некоторых свойств, характерных для малых систем.

Расчеты проводились для систем с ПГУ методом Монте-Карло на основе стандартного алгоритма Метрополиса [10]. Исследуемые системы содержали $N_{\text{эф}} = 500, 864, 1372, 2048, 2916, 4000$ спинов. При этом для достижения термодинамического равновесия для каждой системы отсекался участок марковской цепи длины до 3×10^4 МКшагов/спин, что в несколько раз больше, чем неравновесный участок. Затем осуществлялось усреднение по равновесному участку длины 12×10^5 МКшагов/спин. Для контроля точности результатов проводились и проверочные эксперименты с увеличением этих значений в два раза. При этом сколь угодно заметного улучшения результатов вычислений не наблюдалось.

На рисунках 7б и 8б представлены зависимости C и χ от температуры. Отметим, что в зависимостях теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры проявляются четко выраженные максимумы, как и для частиц Cr_2O_3 , но в данном случае эти максимумы для систем с разным числом спинов $N_{\text{эф}}$ в пределах погрешности совпадают по температуре, что свидетельствует о достаточно хорошем снятии граничных эффектов выбранным способом наложения на систему ПГУ. Наблюдается лишь хорошо выраженный рост максимума при увеличении числа спинов в системе. На рисунке 9б показана зависимость подрешеточной намагниченности m от температуры T для двух систем: с $N_{\text{эф}} = 864$ и $N_{\text{эф}} = 2916$. Отметим монотонное уменьшение значения величины m и то, что эффекты, связанные с конечным числом спинов N , такие, как наличие остаточной намагниченности в высокотемпературной фазе, сильно уменьшаются с ростом $N_{\text{эф}}$. Критическая температура T_N , определенная исходя из данных, представленных на рис. 7–9, содержит большую погрешность.

Для определения критической температуры нами использовался метод кумулянтов Биндера, описанный в разделе 3. Рисунок 2 демонстрирует температурную зависимость кумулянта Биндера четвертого порядка U_L для модели I. Максимальный наклон в зависимости U_L от T может служить оценкой эффективной температуры перехода. Этот метод можно использовать и для систем с разными размерами L , чтобы определить температуру перехода. Дело в том, что в соответствии с теорией конечно-размерного скейлинга при тщательно выполненных расчетах кумулянты для систем всех размеров

Таблица 6. Эффективные значения критического индекса α и критических амплитуд A и A' ($5,0 \times 10^{-3} \leq \varepsilon \leq 7,5 \times 10^{-1}$)

N	$D_0/ J_1 = 2,5 \times 10^{-4}$			$D_0/ J_1 = 2,5 \times 10^{-2}$		
	α	A	A'	α	A	A'
500	-0,15(3)	0,61(2)	0,60(2)	0,11(3)	0,53(3)	0,70(3)
864	-0,15	0,56	0,56	0,12	0,43	0,61
1372	-0,16	0,51	0,49	0,10	0,44	0,57
2048	-0,12	0,47	0,46	0,13	0,44	0,52
2916	-0,15	0,53	0,53	0,10	0,38	0,42
4000	-0,14	0,47	0,48	0,15	0,42	0,43

должны пересекаться в точке с температурой $T = T_c$. Для ферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга со взаимодействием между ближайшими соседями все аспекты, связанные с определением T_c этим способом, подробно изучены в работах [128, 146].

Определенные таким образом значения T_N соответственно для моделей I и II равны $T_N = 0,466(5)$ и $T_N = 0,480(5)$, эти значения и использовались нами в качестве критических. Некоторое повышение температуры перехода при увеличении значения анизотропии для модели II согласуется с известным фактом о более высоком значении T_c изинговских систем по сравнению с гейзенберговскими. Далее мы еще раз увидим, что использованное нами значение анизотропии $D_0/|J_1| = 2,5 \times 10^{-2}$ для модели II усиливает изинговские свойства рассматриваемой модели и сказывается на значениях всех критических параметров.

Аппроксимации расчетных данных по теплоемкости выполнялись с использованием выражений (5.4) и (5.5). И для этого случая (5.5) обеспечивало меньшую погрешность для наших данных. Полученные значения α , A , A' для модели I и модели II представлены в табл. 6 (для расчета A' при $T < T_N$ использовалось предсказание статического скейлинга $\alpha' = \alpha$ [1]). Все значения α для модели I имеют отрицательный знак, характерный для модели Гейзенберга, практически не зависят от числа спинов в системе и хорошо согласуются с теоретическим значением $\alpha = -0,126(28)$, полученным для изотропной модели Гейзенберга с короткодействующими силами [6–8]. Соотношения между критическими амплитудами A и A' , определенные по указанной схеме, для всех систем удовлетворяют условиям $0,90 \leq A/A' \leq 1,10$. Картина сильно меняется для модели II, для которой значения α положительны, что является характерной чертой модели Изинга. Теоретическое значение α для модели Изинга, полученное на основе ε -разложения, равно $\alpha = 0,108(9)$ [6–8]. Очевидно, что относительно большое значение одноионной анизотропии, характерное для малых маг-

нитных частиц [192, 193] и принятое нами для модели II, делает в этом случае системы с ПГУ изинговскими. Отметим, что системы со свободными поверхностями при этом же значении анизотропии сохраняли гейзенберговский характер критического поведения [185, 186]. Для модели II отношение между критическими амплитудами удовлетворяет соотношению $0,75 \leq A/A' \leq 0,9$.

При $\varepsilon \rightarrow 0$ в такой системе ожидается кроссовер от гейзенберговского критического поведения к изинговскому [191]. Для модели I и модели II теоретические значения температур кроссовера, рассчитанные из наших данных, соответственно равны $\varepsilon_{cr} \approx 0,0013$ и $\varepsilon_{cr} \approx 0,052$. Значения α , полученные для модели I в интервале $5 \times 10^{-3} \leq \varepsilon \leq 7,5 \times 10^{-1}$, не обнаруживают наличия кроссовера. А модель II во всех температурных интервалах проявляет изинговский характер.

Рассмотрим зависимость подрешеточной намагниченности m и восприимчивости χ от температуры. Из рисунка 9б видно, что с ростом температуры m монотонно уменьшается, при этом даже далеко выше T_N подрешеточная намагниченность отлична от нуля. Для аппроксимации критического поведения m использовалось выражение (5.6). В таблице 7 представлены значения β , полученные в разных диапазонах температур ε . Отметим, что значения β для модели I в одном и том же температурном интервале несколько выше, чем для модели II. Индекс β проявляет те же особенности, что и малые магнитные частицы, т.е. абсолютные величины β увеличиваются с ростом $N_{эф}$ и ε_{min} .

Обе эти особенности мы связываем с эффектами ближнего порядка (рис. 9б).

В зависимости подрешеточной намагниченности m от приведенной температуры ε , представленной в двойном логарифмическом масштабе для модели I, наблюдается характерный для кроссовера излом. Рисунок 10б демонстрирует эту зависимость с двумя значениями $\beta \approx 0,31(2)$ при $\varepsilon \leq \varepsilon_{cr}$ и $\beta \approx 0,36(2)$ при $\varepsilon > \varepsilon_{cr}$ для системы с $N_{эф} = 1372$. В модели I аналогичная картина наблюдается для систем всех размеров. Вероятно, эти данные свидетельствуют о наличии в модели I кроссовера от гейзенберговского критического поведения с $\beta \approx 0,36$ (теоретическое значение β для модели Гейзенберга $\beta = 0,367$ [6–8]) к изинговскому с $\beta \approx 0,31$ (для модели Изинга $\beta = 0,326$ [6–8]), что не наблюдалось в поведении теплоемкости.

В аналогичной зависимости m от ε для модели II не наблюдаются какие-либо особенности, присущие модели I и полученные для этой модели значения $\beta \approx 0,30(2)$ весьма близки к теоретически предсказанным для модели Изинга.

Таблица 7. Эффективные значения критического индекса β ($\varepsilon_{max} = 7,5 \times 10^{-1}$)

N	$D_0/ J_1 = 2,5 \times 10^{-4}$					$D_0/ J_1 = 2,5 \times 10^{-2}$				
	ε_{min}									
	5×10^{-3}	1×10^{-2}	2×10^{-2}	4×10^{-2}	8×10^{-2}	5×10^{-3}	1×10^{-2}	2×10^{-2}	4×10^{-2}	8×10^{-2}
500	0,24(3)	0,25	0,26	0,28	0,28	0,18	0,21	0,23	0,24	0,25
864	0,25	0,26	0,27	0,29	0,29	0,20	0,23	0,24	0,25	0,26
1372	0,27	0,29	0,32	0,35	0,36	0,21	0,24	0,25	0,26	0,27
2048	0,28	0,28	0,32	0,33	0,34	0,21	0,24	0,25	0,26	0,28
2916	0,31	0,34	0,35	0,36	0,37	0,25	0,26	0,27	0,29	0,30
4000	0,33	0,35	0,36	0,38	0,38	0,27	0,27	0,28	0,29	0,31

Таблица 8. Эффективные значения критических индексов γ и γ' для системы с ПГУ ($\varepsilon_{\max} = 0,75$, $D_0/|J_1| = 2,5 \times 10^{-4}$)

N	γ				γ'			
	ε_{\min}				ε_{\min}			
	1×10^{-2}	2×10^{-2}	4×10^{-2}	8×10^{-2}	1×10^{-2}	2×10^{-2}	4×10^{-2}	8×10^{-2}
500	0,86	1,05	1,08	1,17	0,92	1,07	1,15	1,29(4)
864	0,87	1,07	1,10	1,17	0,93	1,08	1,20	1,31
1372	0,89	1,09	1,13	1,19	0,94	1,10	1,15	1,32
2048	0,90	1,11	1,15	1,21	0,96	1,12	1,19	1,31
2916	0,89	1,10	1,11	1,18	1,03	1,14	1,21	1,34
4000	0,93	1,12	1,17	1,23	1,03	1,15	1,22	1,33

Экспериментальное значение β для Cr_2O_3 , найденное в интервале температур $3 \times 10^{-5} \leq \varepsilon \leq 3 \times 10^{-2}$, составляет $\beta = 0,35$ [194] и близко к теоретическому значению модели Гейзенберга, а также к докроссоверной величине, рассчитанной нами для модели I.

Типичные зависимости восприимчивости χ от температуры T показаны на рис. 8б. Для их аппроксимации использовалась простая степенная функция (5.7). В таблице 8 представлены γ и γ' , полученные для модели I. Значения γ и γ' находились независимо из данных при $T > T_N$ и $T < T_N$ соответственно. Отметим, что γ и γ' так же, как и α , не зависят от числа спинов $N_{\text{эф}}$ в исследуемой системе, но их значения увеличиваются с ростом ε_{\min} . По абсолютным величинам γ и γ' трудно судить о характере критического поведения восприимчивости как о гейзенберговском ($\gamma = 1,39$ [6–8]) или об изинговском ($\gamma = 1,24$ [6–8]). Аналогичные данные, полученные этим способом для модели II, в пределах погрешности совпадают с представленными в табл. 8. Возможно, такое поведение γ и γ' связано с недостаточной разрешающей способностью способа обработки сильно флуктуирующей величины, такой, какой является восприимчивость. Как мы увидим в следующем разделе, анализ тех же данных на основе другого подхода дает более ясную картину критического поведения восприимчивости.

Результаты, которые до сих пор нами обсуждались в этом разделе, были получены при аппроксимации МК данных традиционными степенными функциями. Рассмотрим анализ тех же данных на основе представлений теории конечно-размерного скейлинга.

5.3. Конечно-размерный скейлинг

и критические индексы моделей реальных магнетиков
Конечные системы хорошо воспроизводят свойства бесконечных до тех пор, пока корреляционная длина ξ не превышает линейного размера системы L . Когда вблизи критической точки $\xi \geq L$, свойства критических систем в значительной мере зависят от типа ПГУ, и при их наличии флуктуации могут "перекидываться" на противоположные стороны, чего в реальных системах не бывает. Следствием этого является появление эффектов "округления", например, появление эффектов дальнего порядка выше T_c , сглаживание пиков теплоемкости и восприимчивости, смещение их по температуре и т.д. Первую теорию, учитывающую влияния конечных размеров на критические явления, разработали Фердинанд и Фишер [195, 196]. В наиболее полном виде теория конечно-размерного скейлинга (КРС) представлена в [96]. Идеи, заложенные в этой теории, позволяют экстраполировать МК результаты, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу

($N = L^3 \rightarrow \infty$) и широко используются [119, 120, 128, 147, 148]. Согласно этой теории свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре T , близкой к критической температуре T_c бесконечной системы, может быть представлена в виде

$$F(T, L) \sim L^{-d} F_0(\varepsilon L^{1/\nu}), \quad (5.8)$$

где $\varepsilon = |T - T_c|/T_c$, $T_c = T_c(L = \infty)$ 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

$$\frac{k_B T_c(L)}{J} = \frac{k_B T_c}{J} + a L^{-1/\nu}, \quad (5.9)$$

где a — некоторая константа. Уравнение (5.8) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, спонтанной намагниченности и восприимчивости, приходящихся на один спин [119]:

$$C(T, L) \sim L^{\alpha/\nu} C_0(\varepsilon L^{1/\nu}), \quad (5.10)$$

$$m(T, L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(\varepsilon L^{1/\nu}), \quad (5.11)$$

$$\chi(T, L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(\varepsilon L^{1/\nu}), \quad (5.12)$$

где α , β , γ — статические критические индексы для системы с $L = \infty$. Они связаны соотношением гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [4].

Уравнения (5.10)–(5.12) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечных систем при $\varepsilon \ll 1$ и $L \rightarrow \infty$. Справедливость теории конечно-размерного скейлинга была показана в МК расчетах на $2d$ и $3d$ моделях Изинга как с периодическими граничными условиями, так и со свободными поверхностями [91, 92, 119, 120]. Применение уравнений (5.10)–(5.12) к данным МК экспериментов должно снимать размерные эффекты. В какой степени соотношения теории КРС снимают размерные эффекты для наших данных, можно судить по рис. 11, где представлены результаты масштабирования восприимчивости для модели II. Аналогично масштабируются данные и для модели I. Столь же эффективно работают эти уравнения применительно к теплоемкости и подрешеточной намагниченности для обеих моделей.

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

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (5.13)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (5.14)$$

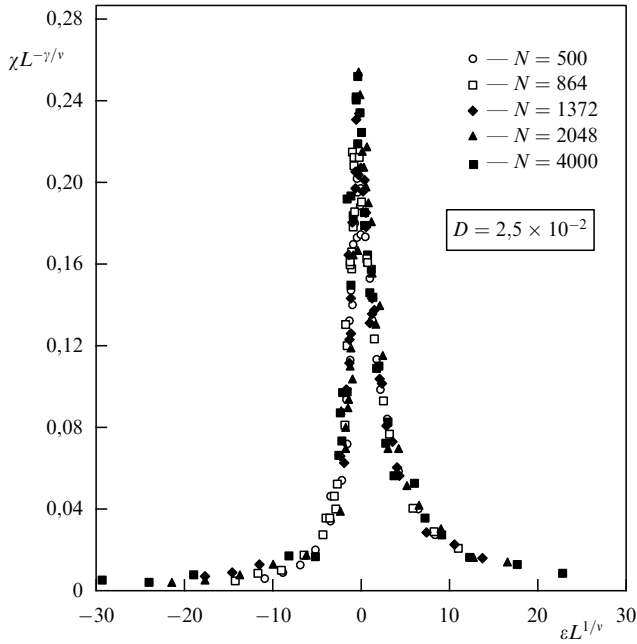


Рис. 11. Масштабирование восприимчивости Sr_2O_3 в соответствии с уравнением (5.12) для модели II.

Анализ наших данных, выполненный на основе соотношений (5.13) и (5.14), также позволил определить значения β и γ . Для этого строились в двойном логарифмическом масштабе зависимости m и χ от линейных размеров решетки L (рис. 12 и рис. 13). Все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Отметим, что даже самая маленькая система $L \approx 8$ не выпадает из общей закономерности расположения точек. По-видимому, асимптотический конечно-размерный скейлинговый режим достигается уже при $L \geq 8$. Кривые на рисунках проведены в соответствии с методом наименьших квадратов. Угол наклона прямой определяет значения β/v и γ/v . Полученные таким образом значения этих величин для модели I равны $\beta/v = 0,544$ и $\gamma/v = 1,985$. Если учесть, что модель I проявляет явно выраженный гейзенберговский характер и принять, что $\nu = 0,706$ [6–8], то имеем $\beta = 0,38(2)$ и $\gamma = 1,38(2)$. Отметим, что эти значения β и γ согласуются с теоретически рассчитанными для модели Гейзенберга ($\beta = 0,368$, $\gamma = 1,39$ [6–8]). Для модели II имеем $\beta/v = 0,426$ и

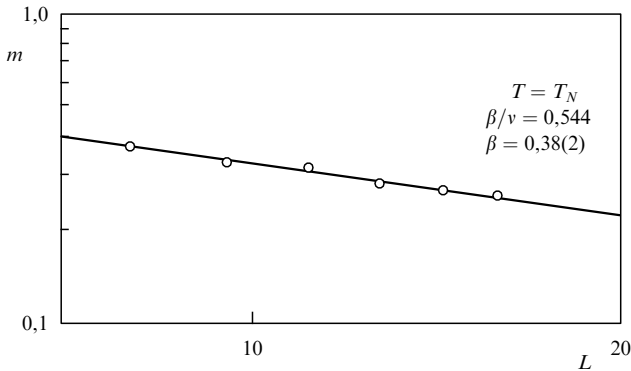


Рис. 12. Двойная логарифмическая зависимость подрешеточной намагниченности m от приведенной температуры ϵ для Sr_2O_3 (модель I).

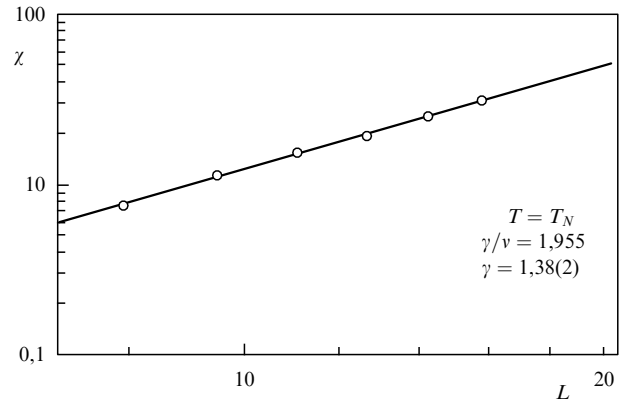


Рис. 13. Зависимость восприимчивости χ от L при $T = T_N$ для Sr_2O_3 (модель I).

$\gamma/v = 1,791$. Поскольку эта модель проявляет изинговский характер, а исходный гамильтониан гейзенберговский, определим индексы как при $\nu = 0,706$ (модель Гейзенберга), так и при $\nu = 0,63$ (модель Изинга). Таким образом, $\beta = 0,30(2)$, $\gamma = 1,26(3)$ при $\nu = 0,706$ и $\beta = 0,27(2)$, $\gamma = 1,13(3)$ при $\nu = 0,63$. Отметим, что результаты, полученные для модели II, при $\nu = 0,706$ близки к теоретическим значениям модели Изинга ($\beta = 0,326$, $\gamma = 1,24$ [6–8]), а при $\nu = 0,63$ несколько меньше.

При ярко выраженном пикообразном ходе зависимости теплоемкости обычно для масштабирования C_{\max} используется следующее выражение [128, 197]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (5.15)$$

где a — некоторый коэффициент (рис. 14). Аппроксимация данных, выполненная на основе выражения (5.15), дает значения критического индекса $\alpha = -0,14(3)$ для модели I. А для модели II $\alpha = 0,16(3)$ при $\nu = 0,706$ и $\alpha = 0,14(3)$ при $\nu = 0,63$. Эти результаты также хорошо согласуются с теоретическими данными, полученными для модели Гейзенберга ($\alpha = -0,126$ [6–8]) и модели Изинга ($\alpha = 0,108$ [6–8]), а также с данными, полученными при анализе результатов МК расчетов на основе традиционных степенных функций.

Наши результаты, полученные методом МК при изучении моделей реального антиферромагнетика Sr_2O_3 , свидетельствуют о том, что модель I со слабой анизотропией в исследованных режимах все еще проявляет

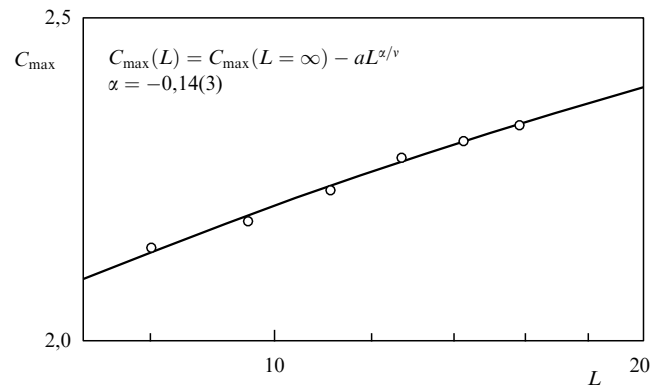


Рис. 14. Зависимость максимума теплоемкости C_{\max} от L для Sr_2O_3 (модель I).

гейзенберговский характер критического поведения. Критические индексы теплоемкости α , определенные аппроксимацией данных степенными функциями и из соотношений теории конечно-размерного скейлинга, хорошо согласуются как между собой, так и с теоретическими значениями.

Индексы β и γ , определенные традиционным способом на основе выражения (5.6) и (5.7), проявляют специфику, характерную для МК данных, и по ним трудно судить о характере критического поведения. Значения α , β и γ , полученные из обработки тех же данных в соответствии с теорией КРС, характеризуют модель I как гейзенберговскую с критическими индексами $\alpha = -0,14(3)$, $\beta = 0,38(2)$, $\gamma = 1,38(2)$.

Анализ данных, полученных при $D_0/|J_1| = 2,5 \times 10^{-2}$ (модель II) и обработанных на основе обоих подходов, свидетельствует о том, что модель II проявляет изинговский характер критического поведения.

Отметим, что хотя значения критических индексов α , β , γ , полученных на основе теории КРС, лучше согласуются с теоретическими и экспериментальными результатами, анализ этих же данных аппроксимацией традиционными степенными функциями позволяет получить обширную дополнительную информацию. По нашему мнению, для составления наиболее полной картины критического поведения такого рода систем необходим анализ результатов МК моделирования как первым, так и вторым способом.

6. Динамическое критическое поведение: исследования методами Монте-Карло

Исследование динамических свойств конденсированных систем вблизи критических точек — традиционная задача статистической физики. Вопрос о построении теории динамических критических явлений, исходя из микроскопических гамильтонианов, является одной из центральных в современной теории ФП и КЯ и все еще далек от своего полного решения. Несмотря на это, существующие аналитические теории на основе РГ [2], теории взаимодействующих мод [4] и динамического скейлинга [2, 4] при исследовании спиновых систем исходят из микроскопических гамильтонианов. Отметим, что теоретические и экспериментальные исследования в этом направлении сталкиваются с огромными трудностями [198–205]. Тем не менее на сегодняшний день наиболее существенным результатом теоретических исследований критической динамики стало применение метода ренормализационной группы и ϵ -разложения [3] к динамическим критическим явлениям [198, 199]. В результате был рассчитан динамический критический индекс z (табл. 9) для конкретных моделей и установлены основные факторы, влияющие на его численные значения. Анализ динамических критических явлений показывает, что индекс z является одной из важнейших характеристик критической динамики. Оказалось, что z зависит не только от размерности пространства d , числа степеней свободы параметра порядка n и характера упорядочивающегося взаимодействия, но и от выполнимости законов сохранения характерной энергии и параметра порядка. Основное выражение динамического скейлинга, из которого определяется критический индекс z , имеет вид [1]

$$\omega = q^z f(q\xi_c), \quad (6.1)$$

Таблица 9. Теоретические значения динамического критического индекса z

Модель спиновой системы	Класс универсальности статического критического поведения	Закон подобия	Примерные численные значения для $d = 3$
Модель А. Анизотропные магнетики: параметр порядка и энергия не сохраняются	(1, d)	$z = 2 + c\eta$, $c = 6 \ln(4/3) - 1$	2
Модель С. Анизотропные магнетики: параметр порядка не сохраняется, энергия сохраняется	(1, d)	$z = 2 + \alpha/\nu$, $n = 3$; $z = 2 + 2\alpha/n\nu$, $0 < n \leq 2$; $z = 2, n \geq 4$	2
Модель Г. Изотропные антиферромагнетики	(3, d)	$z = d/2$	3/2
Модель J. Изотропные ферромагнетики	(3, d)	$z = (d + 2 - \eta)/2$	5/2
Ферромагнетики с дипольными взаимодействиями: нормальная динамика; жесткая динамика	(3, d)	$z = 2 - \eta$, $z = 2 + c\eta$, $c = 0,94$; $z = (5 - \eta)/2 - 1/\nu$	2 2 1

где ω — характерная частота флуктуаций с волновым вектором q , ξ_c — критический радиус корреляции.

Динамические критические свойства магнитоупорядоченных материалов, особенно ферромагнетиков, отличаются большим разнообразием и сложностью, которая обусловлена необходимостью учета вместе с сильными обменными взаимодействиями и слабыми релятивистских. Наиболее важными из них являются дипольные взаимодействия; их роль возрастает при приближении к критической точке. В результате критическая область оказывается разделенной на обменную и дипольную [200–202]. Как показывают эксперименты, проведенные на ферромагнетиках, в обменной области справедливы предсказания теории взаимодействующих мод и динамического скейлинга [200–203]. В дипольной области теорией предсказаны два варианта динамики: обычный и жесткий. Экспериментальная ситуация, пока еще неясна из-за противоречивости имеющихся данных [200–204]. Значительные трудности, с которыми сталкиваются теоретические и экспериментальные исследования динамических критических явлений, все еще не преодолены. Есть определенная надежда на то, что методы МК, которые в последние годы интенсивно используются для исследования динамических критических явлений, позволят ответить хотя бы на некоторые важные вопросы. При этом главной особенностью МК экспериментов является то, что все параметры, влияющие на физические процессы, находятся под контролем.

Исследованию различных аспектов динамических свойств модели Изинга и Гейзенберга методами МК уделяется значительное внимание [160, 161, 205–226]. Количественное изучение критической динамики методами Монте-Карло началось относительно недавно, и число таких исследований меньше, чем тех, где изучаются равновесные динамические свойства. В последние годы появился ряд работ, где различные варианты

метода Монте-Карло использованы для изучения динамических свойств вблизи T_c и расчета критического индекса z [207, 208, 211, 213–220, 226]. В значениях критического индекса z , полученных в более ранних работах для модели Изинга, наблюдается большой разброс: от 2,17 [222] до 1,95 [225]. По этим исследованиям можно отметить тенденцию к уменьшению z с увеличением размеров моделируемых систем и длительности расчетов на ЭВМ, что, по-видимому, связано с влиянием эффектов конечных размеров и/или недостаточной статистикой. Некоторые результаты, получаемые с использованием суперкомпьютеров и мощных специализированных вычислительных комплексов на решетках с довольно большими размерами ($L \times L \times L$, $L = 512$), дают значения для $3d$ модели Изинга $z = 1,95$ [223] и $z = 1,99$ [226]. И эти значения (несмотря на неплохую точность) не согласуются с предсказанным ε -разложением значением для нижней границы $z = 2$ для всех систем с пространственной размерностью от 1 до 4 [227].

В работах [207, 208] предпринята попытка внести ясность в противоречивый характер значений для z в модели Изинга. В [208] проанализированы возможные систематические ошибки, которые встречаются в МК исследованиях динамических свойств. Здесь изучены временные корреляционные функции $\Phi(t)$ для намагниченности и энергии в T_c на ПК решетках с ПГУ и размерами $L \times L \times L$, $L \leq 96$. Показано, что временные корреляционные функции $\Phi_A(t)$ некоторой термодинамической величины A в МК расчетах можно представить в виде

$$\Phi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A(0) \rangle \langle A(0) \rangle}{\langle A(0)A(0) \rangle - \langle A(0) \rangle \langle A(0) \rangle} \quad (6.2)$$

при условии, что число МК шагов $N \rightarrow \infty$. В общем случае функция $\Phi_A(t)$ может быть представлена как [228, 229]

$$\Phi_A(t) = \sum_i a_i \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right), \quad (6.3)$$

где a_i — некоторые неизвестные коэффициенты. Используя нелинейный метод наименьших квадратов для описания поведения $\Phi_A(t)$, получаем значения τ_i , которые могут быть рассмотрены как времена релаксации моделируемых систем. В работе [208] для определения τ_i рассчитаны временные корреляционные функции энергии E на интервале времен t до $t = 1000$ МКшагов/спин и намагниченности M с временами вплоть до $t = 5000$ МКшагов/спин. В [211] рассчитаны соответствующие времена для классической модели Гейзенберга на ПК решетке с $t = 3000$ МКшагов/спин. В этой работе для аппроксимации $\Phi(t)$ используется как обычная экспоненциальная функция $\sim A(\exp(-t/\tau))$, так и двухэкспоненциальная

$$\Phi(t) = a_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + a_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right). \quad (6.4)$$

Оказалось, что времена τ_i , определенные по простой экспоненциальной зависимости, на несколько процентов меньше, чем полученные с использованием выражения (6.4). Для определения критического индекса z используется динамический конечно-размерный скейлинг [230].

В соответствии с этим в динамической критической области релаксационное время τ масштабируется следующим образом:

$$\tau(\xi, L, \varepsilon) = L^z f\left(\frac{\xi}{L}, \varepsilon L^{-z}\right), \quad (6.5)$$

где ξ — корреляционная длина и $f(x, y)$ — скейлинговая функция. В точке T_c характерная длина масштабирования определяется линейными размерами системы L , и в этом случае время релаксации определяется как $\tau \sim L^z$ при асимптотически больших значениях $L \rightarrow \infty$.

Значение критического индекса z , определенное для модели Изинга по зависимостям намагниченности $\Phi_M(t)$ для решеток с $L \geq 12$, равно $2,04 \pm 0,03$, что хорошо согласуется с результатом, предсказанным ε -разложением [199]: $z = 2,02$. Результаты исследования функции $\Phi_E(t)$ значительно менее точны и дают оценку $z = 2,03 \pm 0,10$.

Следует обратить внимание и на некоторые вопросы методологического характера. В [208] показано, что для системы с $L \leq 12$ наблюдаются отклонения от асимптотического режима и необходим учет коррекции к конечно-размерному скейлингу. На примере моделирования системы с $L = 12$ установлено, что на времена релаксации может влиять и тип использованных периодических граничных условий, хотя и следует ожидать уменьшения этого влияния с ростом L . Эти моменты свидетельствуют о том, что при исследовании динамических критических явлений с серьезными трудностями сталкиваются не только теоретические и экспериментальные методы, но и численные.

Характерные результаты, полученные на основе такого подхода для модели Гейзенберга [211] на ПК решетках, представлены на рис. 15. Оценка $z = 1,96(6)$ получена из данных, показанных на этом же рисунке, после использования корректирующей процедуры, описанной в [211] (рис. 15, штриховая линия). Полученное

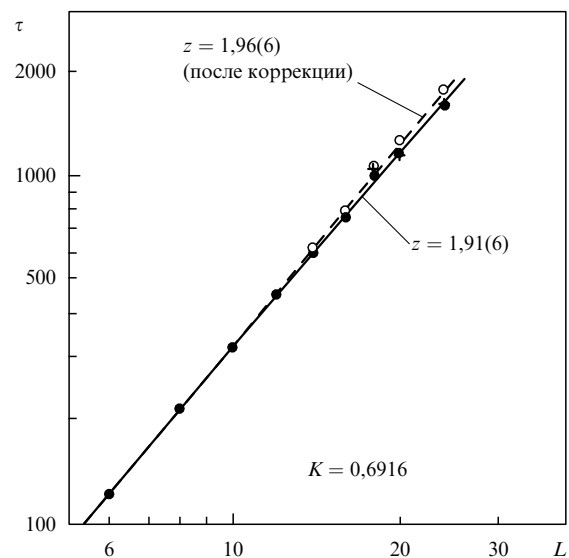


Рис. 15. Двойная логарифмическая зависимость времени релаксации τ намагниченности для $3d$ модели Гейзенберга от размеров решетки L при $T = T_c$ ($K_c = J/k_B T_c = 0,6929$) [211].

таким образом значение z несколько отличается от предсказанного теорией РГ [231–233]:

$$z = 2 + c\eta, \quad c = 6 \ln\left(\frac{3}{4}\right) - 1; \quad (6.6)$$

отсюда следует $z \approx 2,024$. Но МК оценка z согласуется с предсказанием классической теории критического замедления $z = 2 - \eta$ [234, 235]. Разницу между МК и РГ данными авторы [211] объясняют тем, что в МК данных происходит систематическое смещение результатов, например из-за слишком узкой области изменения L от 6 до 24. Другая возможная причина — это конечное число шагов МК моделирования, как указано в [208] (погрешностью такого рода тоже нельзя пренебречь даже при значительной МК статистике).

Различные экспериментальные исследования дают для модели Гейзенберга значения в пределах 1,88–2,09, содержат большую ошибку измерений ($\pm 0,05$), согласуются с теорией лишь качественно и не проясняют ситуацию.

Прямое сравнение результатов МК с данными лабораторных экспериментов затруднено, так как "искусственная" стохастическая динамика в МК процессе дает чисто релаксационное поведение. Стоит отметить также, что недавние эксперименты по исследованию критического поведения изотропных ферромагнетиков (EuO, EuS) обнаружили кроссовер от $z \approx 2,5$ к $z \approx 2,0$, что, по-видимому, объясняется наличием диполь-дипольных взаимодействий [211].

Имеется возможность определить z и на основе зависимости времени релаксации от близости к критической температуре [199]. Если корреляционная длина ξ расходится при приближении к T_c как $\xi \sim ((T - T_c)/T_c)^{-\nu} = (\varepsilon)^{-\nu}$, то зависимость времени релаксации от температуры определяется выражением

$$\tau \sim \left(\frac{T}{T_c} - 1\right)^{-\theta}, \quad (6.7)$$

где $\theta = z\nu$. Характерная конечно-размерная скейлинговая зависимость τ от ε для 3d модели Гейзенберга на ПК решетке, показанная на рис. 16, получена из выражения

$$\tau_L(\varepsilon) = L^z f(\varepsilon L^{1/\nu}). \quad (6.8)$$

Рассчитанные для модели Изинга значения $\theta = 1,28$ [208] и для модели Гейзенберга значения $\theta = 1,38$ [211] наилучшим образом описывают экспериментальные МК данные. Используя значения $\nu = 0,63$ и $\nu = 0,706$ соответственно для моделей Изинга и Гейзенберга, получим $z = 2,03$ и $z = 1,95$. Результат $\theta = 1,38(1)$ для модели Гейзенберга не только совпадает с предсказанным методом РГ значением $\theta = 1,38(5)$, но и превосходит его по точности. Обратим внимание на то, что для обеих моделей z , полученные как из зависимости τ от размеров моделируемых систем, так и из зависимости τ от температуры, хорошо согласуются друг с другом. В [208] отмечено, что точность вычисления z для модели Изинга первым способом выше, чем вторым, и обсуждаются возможные причины отличия значений, полученных другими авторами, от теоретически предсказанных.

В последние годы большой интерес вызывают исследования, направленные на выяснение степени влияния

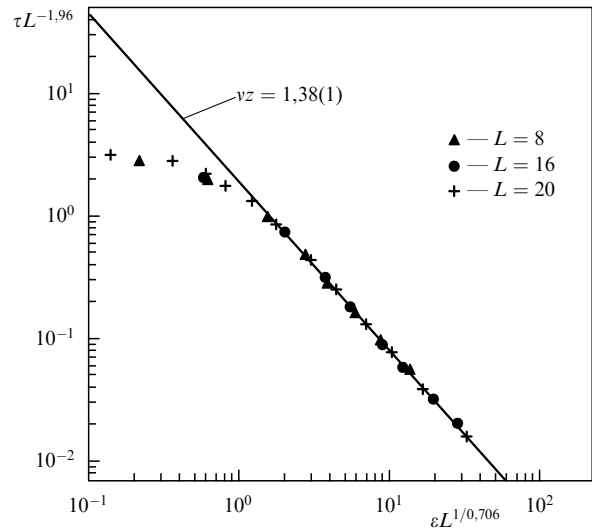


Рис. 16. Конечно-размерная скейлинговая зависимость времени релаксации τ для 3d модели Гейзенберга от приведенной температуры ε в двойном логарифмическом масштабе в парамагнитной области $K_c = J/k_B T_c = 0,6929$ [211].

примесей, дефектов и других неидеальных черт реальных кристаллов на поведение систем при фазовых переходах [107]. Например, установлено [236], что наличие примесей изменяет критические свойства магнетиков с расходящейся в T_c теплоемкостью. А метод РГ [237, 238] показал, что критическое поведение разбавленной модели Изинга относится к новому классу универсальности, и значения критических индексов до определенного порога не зависят от концентрации точечных примесей. В этом плане интересны работы В.В. Прудникова с соавторами, в которых исследована критическая динамика разбавленных изинговских систем. В работах [213, 214] изучена 3d модель Изинга с размерами $L \times L \times L$ ($L = 48$) при различных значениях концентрации спинов $p = 1,0; 0,95; 0,8; 0,6; 0,4$. Для определения критического индекса z использован метод МК совместно с методом динамической РГ [224]. Определены значения критического индекса $z(p)$ в зависимости от концентрации спинов: $z(1,0) = 1,98 \pm 0,08$; $z(0,95) = 2,19 \pm 0,07$; $z(0,8) = 2,20 \pm 0,08$; $z(0,6) = 2,58 \pm 0,09$; $z(0,4) = 2,65 \pm 0,12$. По данным этих работ весь интервал исследованных концентраций можно разделить на отдельные области, для каждого из которых критические индексы в пределах погрешности совпадают. В то же время для разных областей индексы z разные. Для объяснения этих закономерностей предложена гипотеза ступенчатой универсальности критических индексов трехмерных разбавленных изинговских систем. Отметим, что критический индекс $z(1,0) = 1,98 \pm 0,08$ для однородной системы без примесей, определенный в этих работах, хорошо согласуется со значением, полученным с использованием мощной вычислительной техники и специальных алгоритмов кодирования в работе [208]. Аналогичные исследования выполнены и для 2d модели Изинга [215–219] на простой квадратной решетке с концентрациями спинов $p = 1,0; 0,95; 0,9; 0,85; 0,80; 0,75; 0,70$ и размерами решеток $L \times L = 400 \times 400$. Показано, что для концентраций $p \geq 0,9$ критическая динамика неупорядоченной двумерной модели Изинга принадлежит к тому же классу универсальности, что и критическая динамика однород-

ной модели с индексом $z = 2,24 \pm 0,07$. Это значение индекса хорошо согласуется с результатами теоретико-полевого метода [215–219]. Хотя точность определения z в этих работах невысока, объекты исследования и сама процедура, использованная в работе, заслуживают внимания.

7. Заключение

В настоящем обзоре сделана попытка рассмотреть результаты исследований фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло, полученные за последние годы. Этот метод является "идеальным" для исследования "малых" систем, а в сочетании с представлениями теории конечно-размерного скейлинга стал эффективным инструментом изучения и "макросистем". Мы показали, что метод МК превратился в гибкий и мощный инструмент исследования ФП и КЯ не только в классических спиновых системах, но и в квантовых. Он позволяет исследовать сложные модельные системы, исследование которых другими методами сталкивается с большими трудностями, и рассчитывать КИ и КА с высокой степенью точности. Обращено внимание на отдельные работы, в которых для конкретных моделей удалось установить классы универсальности исходя из МК данных. На конкретном примере рассмотрены результаты исследования критических свойств моделей реальных магнитных материалов. Для этих моделей были представлены критические параметры, полученные как на основе аппроксимации данных метода МК традиционными степенными функциями, так и на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга. Все результаты численных экспериментов сопоставлены между собой, с теоретическими предсказаниями, а также с данными лабораторных экспериментов.

К сожалению, за рамками нашего обсуждения остались такие области приложения метода МК, как спиновые стекла, сегнетоэлектрики, высокотемпературные сверхпроводники, жидкости, полимеры и некоторые другие. Области применения метода МК столь обширны, что в одном обзоре нет возможности рассмотреть все эти чрезвычайно интересные и часто напрямую не взаимосвязанные разделы современной физики фазовых переходов и критических явлений. С нашей точки зрения, представляют определенный интерес и требуют более подробного обсуждения и новейшие высокоэффективные методы МК, специально разработанные для исследований критической области. По-видимому, это и более подробный разбор квантовых методов МК — тема для отдельного обзора.

Список литературы

- Паташинский А З, Покровский В Л *Флуктуационная теория фазовых переходов* 2-е изд. (М.: Наука, 1982)
- Ма Ш *Современная теория критических явлений* (М.: Мир, 1980)
- Вильсон К, Когут Дж *Ренормализационная группа и ϵ -разложение* (М.: Мир, 1975)
- Стенли Г *Фазовые переходы и критические явления* (М.: Мир, 1973)
- Гинзбург В Л *ФТТ* **2** 2031 (1960)
- Le Guillou J J C, Zinn-Justin J *Phys. Rev. B* **21** 3976 (1980)
- Le Guillou J J C, Zinn-Justin J *J. Phys. Lett. (Paris)* **46** L137 (1985)
- Antonenko S A, Sokolov A I *Phys. Rev. E* **51** 1894 (1995)
- Гинзбург В Л *О физике и астрофизике* (М.: Наука, 1985)
- Биндер К и др. *Методы Монте-Карло в статистической физике* (М.: Мир, 1982)
- Замалин В М, Норман Г Э, Филинов В С *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике* (М.: Наука, 1977)
- Биндер К, Хеерман Д В *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике* (М.: Наука, 1995)
- Хеерман Д В *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике* (М.: Наука, 1990)
- Кунин С Е *Вычислительная физика* (М.: Мир, 1992)
- Binder K, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. 5B (Eds C Domb, M S Green) (New York: Academic Press, 1976)
- Mouritsen O G *Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena* (Berlin: Springer-Verlag, 1984)
- Landau D P *Physica A* **205** 41 (1994)
- Computer simulation Studies (Condensed Matter Physics)* (Berlin: Springer, 1988)
- Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Наука, 1976)
- Вуд В В "Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло", в кн. *Физика простых жидкостей* (М.: Мир, 1978)
- Ермаков С М *Метод Монте-Карло и смежные вопросы* 2-е изд. (М.: Наука, 1975)
- Metropolis N et al. *J. Chem. Phys.* **21** 1087 (1953)
- Goodman J, Sokal A D *Phys. Rev. Lett.* **56** 1015 (1986)
- Goodman J, Sokal A D *Phys. Rev. D* **40** 2035 (1989)
- Kandel D et al. *Phys. Rev. Lett.* **60** 1591 (1988)
- Kandel D, Domany E, Brand A *Phys. Rev. B* **40** 330 (1980)
- Ben-Av R et al. *J. Stat. Phys.* **58** 125 (1990)
- Kandel D, Ben-Av R, Domany E *Phys. Rev. Lett.* **65** 941 (1990)
- Creutz M *Phys. Rev. D* **36** 515 (1987)
- Brown F R, Woch T J *Phys. Rev. Lett.* **58** 2394 (1987)
- Adler S L *Phys. Rev. D* **38** 1349 (1988)
- Adler S L *Phys. Rev. D* **23** 2901 (1981)
- Schmidt K E *Phys. Rev. Lett.* **51** 2175 (1983)
- Faas M, Hilhorst Y J *Physica A* **135** 571 (1986)
- Hahn H H, Streit T S J *Physica A* **154** 108 (1988)
- Stoll E P *J. Phys. Condens. Matter* **1** 6959 (1989)
- Swendsen R H, Jang J-S *Phys. Rev. Lett.* **58** 86 (1987)
- Wolff U *Phys. Rev. Lett.* **62** 361 (1989)
- Ferrenberg A M, Swendsen R H *Phys. Rev. Lett.* **61** 2635 (1988)
- Ferrenberg A M, Swendsen R H *Phys. Rev. Lett.* **63** 1195 (1989)
- Campos P R A, Onody R N *Phys. Rev. B* **56** 14529 (1997)
- Swendsen R H, Jang J-S *Phys. Rev. Lett.* **57** 2607 (1986)
- Hokushima K, Nemoto K *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 1604 (1996)
- Jang J-S, Swendsen R H *Phys. Rev. B* **38** 4840 (1988)
- Jang J-S, Swendsen R H *Phys. Rev. B* **38** 9086 (1988)
- Klein W, Ray T, Tamayo P *Phys. Rev. Lett.* **62** 163 (1989)
- Suzuki M *Prog. Theor. Phys.* **56** 1454 (1976)
- Suzuki M *Prog. Theor. Phys.* **58** 1377 (1977)
- De Raedt H, Lagendijk A *Phys. Rev. Lett.* **46** 77 (1981)
- Hirsch I E et al. *Phys. Rev. Lett.* **47** 1628 (1981)
- De Raedt H, Lagendijk A *Phys. Rep.* **127** 233 (1985)
- Fay R M *Phys. Rev. B* **33** 6271 (1986)
- Wiessler A *Phys. Lett. A* **82** 359 (1982)
- Novotny M A, Landau D P *Bull. Am. Phys. Soc.* **24** 361 (1979)
- Cullen I I, Landau D P *Bull. Am. Phys. Soc.* **26** 576 (1981)
- Елесин В Ф, Кашурников В А *ЖЭТФ* **106** 1773 (1994)
- Берков Д В, Мешков С В *Письма в ЖЭТФ* **52** 1021 (1990)
- Кашурников В А *ЖЭТФ* **108** 1796 (1995)
- Kashurnikov V A *Phys. Rev. B* **53** 5932 (1996)
- Кашурников В А, Харченко Ю Г *Письма в ЖЭТФ* **63** 860 (1996)
- Кашурников В А, Красавин А В, Свистунов Б В *Письма в ЖЭТФ* **64** 92 (1996)
- Lubartsev A P, Vorontsov-Velyaminov P N *Phys. Rev. A* **48** 4075 (1993)
- Аплеснин С С *ФТТ* **38** 1868 (1996)
- Аплеснин С С *ФТТ* **39** 1404 (1997)
- Аплеснин С С *Phys. Low-Dim. Struct.* (10) 95 (1997)
- Evertz H G, Lana G, Mareu M *Phys. Rev. Lett.* **70** 875 (1993)
- Sandvik A W, Kurkijarvi J *Phys. Rev. B* **43** 5950 (1991)
- Sandvik A W *J. Phys. A* **25** 3667 (1992)

69. Beard B V, Wiese V J *Phys. Rev. Lett.* **77** 5130 (1996)
70. Прокофьев Н В, Свистунов Б В, Тупицын И С *Письма в ЖЭТФ* **64** 853 (1996)
71. Prokofev N V, Svistunov B V, Tupitsyn I S *ЖЭТФ* **114** 570 (1998)
72. Handscomb D C *Proc. Camb. Phys. Soc.* **58** 594 (1962)
73. Handscomb D C *Proc. Camb. Phys. Soc.* **60** 115 (1964)
74. Lyklema I W *Phys. Rev. Lett.* **49** 88 (1982)
75. Lyklema I W *Phys. Rev.* **B 27** 3108 (1983)
76. Lee D H, Joannopoulos I D, Negele I W *Phys. Rev.* **B 30** 1599 (1984)
77. Gomes-Santos G, Joannopoulos I D, Negele I W *Phys. Rev.* **B 39** 4435 (1989)
78. Monousakis E, Salvador R *Phys. Rev.* **B 39** 575 (1989)
79. Chakravarty S C, Stein D B *Phys. Rev. Lett.* **49** 582 (1982)
80. Фаворский И А, Гутман А Г, Рождественский И В *Кристаллография* **30** 1050 (1985)
81. Рождественский И А, Муртазаев А К, Фаворский И А, Препринт ИТФ АН УССР, № ИТФ-87-158Р (Киев: ИТФ АН УССР, 1987) с. 24
82. Фаворский И А и др., Препринт ИТФ АН УССР, № ИТФ-85-94Р (Киев: ИТФ АН УССР, 1985) с. 25
83. Муртазаев А К, Фаворский И А *ФНТ* **18** 144 (1992)
84. Муртазаев А К Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (Л.: ЛГУ, 1987) с. 180
85. Favorsky I A, Kuznetsova T N, Vorontsov-Velyaminov P N *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 2629 (1992)
86. Kuznetsova T V, Vorontsov-Velyaminov P N *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 717 (1993)
87. Rozdestvensky I V, Favorsky I A *Molecular Simulation* **9** 213 (1992)
88. *Monte Carlo Methods in Quantum Problems* (NATO ASI Series. Ser. C, no 125, Ed. M H Kalos) (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1984)
89. Kawashima N, Gubernatis I E *Phys. Rev. Lett.* **73** 1295 (1994)
90. Neirrotti I P, de Olivera M I *Phys. Rev.* **B 53** 668 (1996)
91. Landau D P *Phys. Rev.* **B 13** 2997 (1976)
92. Landau D P *Phys. Rev.* **B 14** 255 (1976)
93. Landau D P *Phys. Rev.* **B 16** 4164 (1977)
94. Binder K Z *Phys. Rev.* **B 43** 119 (1981)
95. Binder K *Phys. Rev. Lett.* **47** 693 (1981)
96. Barber M N, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol. 8 (Eds C Domb, J L Lebowitz) (New York: Academic Press, 1983) p. 1
97. Landau D P, Binder K *Phys. Rev.* **B 31** 5946 (1985)
98. Binder K, Landau D P *Phys. Rev. Lett.* **52** 318 (1984)
99. Peczak P, Landau D P *Phys. Rev.* **B 39** 11932 (1989)
100. Landau D P *J. Magn. Magn. Mater.* **31–34** 11 (1983)
101. Bhatt R N, Yang A P *Phys. Rev. Lett.* **54** 424 (1985)
102. Bidaux R, Boccardo N *Phys. Rev.* **B 34** 4881 (1986)
103. Danino M *Solid State Commun.* **52** 885 (1984)
104. Rieqo H, Young A P *J. Phys. A* **26** 5279 (1993)
105. Gawlimski E T et al. *Phys. Rev.* **B 32** 1575 (1985)
106. Andelman D *Phys. Rev.* **B 34** 6214 (1986)
107. Newman M E J, Barkema G T *Phys. Rev.* **E 53** 393 (1996)
108. Aoyama Y, Chen W, Tanaka M *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 272 (1997)
109. Nagai O et al. *Phys. Rev.* **B 35** 3425 (1987)
110. Dekker C, Dikken B J, Arts A F M *Solid State Commun.* **54** 887 (1985)
111. Neda Z *J. Phys. Soc.* **1** 4 175 (1994)
112. Hau Lu, Ticke J W *J. Magn. Magn. Mater.* **140–144** 1509 (1996)
113. Coppersmith S N *Phys. Rev.* **B 32** 1584 (1985)
114. Kimel J D et al. *Phys. Rev.* **B 35** 3347 (1987)
115. Kerler W, Rehberg P *Phys. Rev.* **B 49** 9688 (1994)
116. Binder K, Landau D P *Phys. Rev.* **B 21** 1941 (1980)
117. Oitmaa J, Fernandez J F *Phys. Rev.* **B 39** 11920 (1989)
118. Hernandez L, Cero H *Phys. Rev.* **B 43** 698 (1991)
119. Ledue D, Landau D P, Teillet J *Phys. Rev.* **B 51** 12523 (1995)
120. Janke W, Katoot M, Villanova R *Phys. Rev.* **B 49** 9644 (1994)
121. Fernandez J F et al. *Phys. Rev.* **B 27** 4274 (1983)
122. Gualin B D, Collins M F *Phys. Rev.* **B 33** 6287 (1986)
123. Serena P A et al. *Phys. Rev.* **B 47** 5027 (1993)
124. Hurcht A, Moschel A, Usadel K D *J. Magn. Magn. Mater.* **148** 32 (1995)
125. Chen K, Ferrenberg A M, Landau D P *J. Appl. Phys.* **73** 5488 (1993)
126. Рождественский И В, Муртазаев А К, Фаворский И А, Препринт ИТФ АН УССР, № ИТФ-87-158Р (Киев: ИТФ АН УССР, 1987)
127. Mailhot A, Plumer M L, Caille A *J. Appl. Phys.* **67** 5418 (1990)
128. Peczak P, Ferrenberg A M, Landau D P *Phys. Rev.* **B 43** 6087 (1991)
129. Муртазаев А К *Матем. моделирование* **4** 114 (1992)
130. Challa M S S, Landau D R, Binder K *Phys. Rev.* **B 34** 1841 (1986)
131. Alves N A, Berg B A, Villanova R *Phys. Rev.* **B 43** 5846 (1991)
132. Chen J-A, Hu Ch-K *Phys. Rev.* **B 50** 6220 (1994)
133. Zhang G-H, Yaug Ch-Zh *J. Phys. A* **26** 4907 (1993)
134. Marcu M, Muller J *Phys. Lett. A* **119** 469 (1987)
135. Mason T E, Collins M F, Gaulin B D *J. Appl. Phys.* **67** 5421 (1990)
136. Harrison A, Mason T E *J. Appl. Phys.* **67** 5424 (1990)
137. Rumirez-Santiago G, Jose J V *Phys. Rev.* **B 49** 9567 (1994)
138. Pires A S T, Pereira A R, Gouvea M E *Phys. Rev.* **B 49** 9663 (1994)
139. Vismanath V S et al. *Phys. Rev.* **B 49** 9702 (1994)
140. Derchko O, Krokhnalskii T *J. Magn. Magn. Mater.* **140–144** 1623 (1995)
141. Cuccoli A, Tognetti V *Phys. Rev.* **B 52** 10221 (1995)
142. Li W-Z, Zhang J-B *Phys. Lett. B* **200** 125 (1988)
143. Stuben H, Hege H-C, Nakamura A *Phys. Lett. B* **244** 473 (1990)
144. Zhang J-B, Ji D-R *Phys. Lett. B* **151** 469 (1990)
145. Espriu D et al. *Nucl. Phys. B* **265** 92 (1986)
146. Ferrenberg A M, Landau D P *Phys. Rev.* **B 44** 5081 (1991)
147. Chen K, Ferrenberg A M, Landau D P *Phys. Rev.* **B 48** 3249 (1993)
148. Holm Ch, Janke W *Phys. Rev.* **B 48** 936 (1993)
149. Mailhot A, Plumer M L, Caille A *Phys. Rev.* **B 50** 6854 (1994)
150. Kawamura H *J. Phys. Soc. Jpn.* **56** 474 (1986)
151. Kawamura H *J. Phys. Soc. Jpn.* **61** 1299 (1992)
152. Nijmeijer M J P, Weis J J *Phys. Rev.* **E 53** 591 (1996)
153. Schlottmann P *Phys. Rev.* **B 33** 4880 (1986)
154. Adler J, Oitmaa J *J. Phys. C* **12** 575 (1979)
155. Нагаев Э Л *УФН* **136** 61 (1982)
156. Roger M, Hetherington J H, Delrien J M *Rev. Mod. Phys.* **55** 1 (1983)
157. Rushbrooke G S, Baker G A, Wood P J, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Eds C Domb, M S Green) (New York: Academic Press, 1974)
158. Raedt H, Lagendijk A *Phys. Rep.* **127** 233 (1985)
159. Аплеснин С С *ФТТ* **37** 1307 (1995)
160. Муртазаев А К, Фаворский И А *ФНТ* **19** 160 (1993)
161. Муртазаев А К, Хизриев К Ш, Камиллов И К, Алиев Х К *Матем. моделирование* **9** 36 (1997)
162. Фаворский И А и др., Препринт ИТФ АН УССР, № ИТФ-85-93Р (Киев: ИТФ АН УССР, 1985)
163. Муртазаев А К, Фаворский И А *Вестник ЛГУ Сер. 4* (3) 18 (1987)
164. Морохов И Д и др. *УФН* **133** 653 (1981)
165. Петров Ю И *Физика малых частиц* (М.: Наука, 1982)
166. Морохов И Д, Трусов Л И, Лаповок В Н *Физические явления в ультрадисперсных средах* (М.: Энергоатомиздат, 1984)
167. Непийко С А *Физические свойства малых металлических частиц* (Киев: Наукова думка, 1985)
168. Петров Ю И *Кластеры и малые частицы* (М.: Наука, 1986)
169. Halperin W P *Rev. Mod. Phys.* **58** 533 (1986)
170. Смирнов Б М *УФН* **162** (1) 119 (1992)
171. Нагаев Э Л *УФН* **162** (9) 49 (1992)
172. Добровицкий В В, Звездин А К, Попков А Ф *УФН* **166** 439 (1996)
173. Гусев А И *УФН* **168** 55 (1998)
174. Звездин А К, Попов А И *ЖЭТФ* **109** 2115 (1996)
175. Звездин А К и др. *ЖЭТФ* **109** 1742 (1996)
176. Dobrovitski V V, Zvezdin A K *Europhys. Lett.* **38** 377 (1997)
177. Мухин А А, Сайко Г В, Звездин А К, Препринт ИОФ РАН, №9 (М.: ИОФ РАН, 1994)
178. Кадомцев Б Б *Динамика и информация* (М.: Ред. журн. *УФН*, 1997)
179. Андреев А Ф *УФН* **168** 655 (1998)
180. Звездин А К и др. *УФН* **168** 1144 (1998)
181. Samuelsen E J, Hutchings M T, Shirane G *Physica* **48** 13 (1970)
182. Altman J O, Murphy J C, Fones S *Phys. Rev. A* **38** 912 (1988)
183. Foner S *Phys. Rev.* **130** 183 (1963)
184. Binder K, Hoenberg P C *Phys. Rev.* **B 9** 2194 (1974)
185. Муртазаев А К и др. *ФНТ* **24** 462 (1998)
186. Муртазаев А К и др. *ФТТ* **40** 1661 (1998)
187. Murtazaev A K et al. *Proceedings of 5th ATPC'98* (Seoul, Korea, 1998) p. 109

188. Bednars G, Geldart D J W, White M A *Phys. Rev. B* **47** 14247 (1993)
189. Marinelli M et al. *Phys. Rev. B* **49** 9523 (1994)
190. Bruce R H, Cannel D S *Phys. Rev. B* **15** 4451 (1977)
191. Камиллов И К, Алиев Х К *Статические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах* (Махачкала: Изд. ДНЦ РАН, 1993)
192. Dormann L J, Fiorani D, Trone E *Adv. Chem. Phys.* **98** 283 (1997)
193. Hendriksen P V, Linderoth S, Lindgard P-A *Phys. Rev. B* **48** 7259 (1993)
194. Fisher E, Gorodetsky G, Shtrikman J. *Phys. Colloq. (Paris)* **32** 1 (1971)
195. Ferdinand A E, Fisher M E *Phys. Rev.* **185** 832 (1969)
196. Fisher M E, Barber M N *Phys. Rev. Lett.* **28** 1516 (1972)
197. Raauw Th T A, Compagner A, Bedeaux D *Physica A* **79** 1 (1975)
198. Halperin B I, Hohenberg P C *Phys. Rev.* **177** 952 (1969)
199. Hohenberg P C, Halperin B C *Rev. Mod. Phys.* **49** 435 (1977)
200. Малеев С В, Препринт ЛИЯФ АН СССР №1038 (Л: ЛИЯФ, 1985)
201. Малеев С В, Препринт ЛИЯФ АН СССР №1039 (Л: ЛИЯФ, 1985)
202. Малеев С В, Препринт ЛИЯФ АН СССР №1039 (Л: ЛИЯФ, 1985)
203. Камиллов И К, Алиев Х К *УФН* **168** 953 (1998)
204. Тейтельбаум Г Б *Письма в ЖЭТФ* **21** 339 (1975)
205. Miyashita S, Takano H *Prog. Theor. Phys.* **73** 1122 (1985)
206. Деменев А Г *Матем. моделирование* **8** 47 (1996)
207. Wansleben S, Landau D P *J. Appl. Phys.* **61** 3968 (1987)
208. Wansleben S, Landau D P *Phys. Rev. B* **43** 6006 (1991)
209. O'Onario De Meo, Reger J D, Binder K *Physica A* **220** 628 (1995)
210. Landau D P, Chen K, Bunker A J. *Magn. Magn. Mater.* **140–144** 1473 (1995)
211. Peczak P, Landau D P *Phys. Rev. B* **47** 14260 (1993)
212. Grandi B C J, Figueiredo W *Phys. Rev. E* **54** 4722 (1996)
213. Вакилов А Н, Прудников В В *Письма в ЖЭТФ* **55** 709 (1992)
214. Прудников В В, Вакилов А Н *ЖЭТФ* **103** 962 (1993)
215. Марков О Н, Прудников В В *Изв. вузов. Сер. Физ.* **37** (8) 83 (1994)
216. Марков О Н, Прудников В В *Письма в ЖЭТФ* **60** (1–2) 24 (1994)
217. Prudnikov V V, Markov O N *Europhys. Lett.* **29** 245 (1995)
218. Prudnikov V V, Markov O N *J. Phys. A* **28** 1549 (1995)
219. Марков О Н, Прудников В В *ФТТ* **37** 1574 (1995)
220. Прудников В В и др. *ЖЭТФ* **114** (3) 972 (1998)
221. Marz R, Hunter D, Jan N *J. Stat. Phys.* **74** 903 (1994)
222. Chakrabarti C K, Baumgartel H G, Stauffer D Z. *Phys.* **44** 333 (1981)
223. Yalabik M C, Gunton J D *Phys. Rev. B* **25** 534 (1982)
224. Jan N, Mosley L L, Stauffer D J. *Stat. Phys.* **33** 1 (1983)
225. Kalle C J. *Phys. A* **17** L801 (1984)
226. Pearson R B, Richardson J L, Touissaint D *Phys. Rev. B* **31** 4472 (1985)
227. Bausch R et al. *Phys. Rev. Lett.* **47** 1837 (1981)
228. Bhanot J, Duke D, Salvador R *Phys. Rev. B* **33** 7841 (1986)
229. Abe R *Prog. Theor. Phys.* **39** 947 (1986)
230. Suzuki M *Prog. Theor. Phys.* **58** 1142 (1977)
231. Halperin B I, Hohenberg P C, Ma S-K *Phys. Rev. B* **10** 139 (1974)
232. Suzuki M *Prog. Theor. Phys.* **50** 1767 (1973)
233. De Dominicis C, Brezin E, Zinn-Justin J *Phys. Rev. B* **12** 4945 (1975)
234. Ландау Л Д, Халатников И В *ДАН СССР* **96** 469 (1954)
235. Van Hove L *Phys. Rev.* **93** 1374 (1954)
236. Harris A B *J. Phys. C* **7** 1671 (1974)
237. Хмельницкий Д Е *ЖЭТФ* **68** 1960 (1975)
238. Grinstein G, Ma S-K, Mazenko G F *Phys. Rev. B* **15** 258 (1977)

Monte Carlo studies of phase transitions and critical phenomena

I.K. Kamilov, A.K. Murtazaev

*DSC Institute of Physics, Russian Academy of Sciences
ul. Yarag'skogo 94, 367003 Makhachkala, Russian Federation
Tel. (8-8722) 62-89 60*

Kh.K. Aliev

*Dagestan State University
ul. M. Gadzhieva 43a, 367025 Makhachkala, Russian Federation
Tel. (8-8722) 67-59 65*

The current state of Monte Carlo work on phase transitions and critical phenomena is reviewed. Both classical and quantum Monte Carlo results are discussed with emphasis on statistical lattice-model studies involving the highly accurate calculation of critical indices. It is shown that finite-size scaling is an effective method whereby not only simple lattice models but also those of complex practical magnetic materials can be treated. For models allowing crossover phenomena, it is shown that both finite-size scaling theory and conventional power-law functions must be used in carrying out a Monte Carlo analysis.

PACS numbers: 02.70.Lq, **64.60.-i**, **75.40.-s**, **75.50.-y**

Bibliography — 238 references

Received 1 April 1999