

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С ВМОРОЖЕННЫМ БЕСПОРЯДКОМ НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев*

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

Поступила в редакцию 31 мая 2004 г.

Методом Монте-Карло исследуется статическое критическое поведение трехмерной модели Изинга с вмороженным беспорядком на трехмерной кубической решетке. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с концентрацией спинов $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.8, 0.6$. Исследовалась система с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20\text{--}60$. Для определения критической температуры использовался метод кумулянтов Биндера. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β и индекса радиуса корреляции ν в рассмотренном интервале концентраций p . Обсуждается вопрос о классах универсальности критического поведения трехмерных разбавленных систем.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение критического поведения разбавленных спиновых систем с вмороженным беспорядком является одной из актуальных задач физики конденсированных сред. Такие системы в последнее время интенсивно исследуются экспериментально [1–3], теоретически [4–13] и методами вычислительной физики [14–21]. В рамках перенормированной теории возмущений был выработан критерий Харриса, который позволяет на качественном уровне предсказать, в каких случаях примеси существенны для критического поведения, а в каких нет [4]. Согласно этому критерию слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда критический индекс теплоемкости положителен, $\alpha > 0$, т. е. теплоемкость в точке перехода является расходящейся. В противоположном случае, когда $\alpha < 0$, т. е. теплоемкость конечна в точке перехода, слабый беспорядок не влияет на критическое поведение. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга.

Изменение критических показателей неупорядоченной трехмерной модели Изинга хорошо установлено в экспериментах [1–3] и теоретических исследованиях [4–13] и согласуется с совокупностью всех имеющихся данных. Однако до сих пор невыясненным остается следующий вопрос: являются ли новые критические индексы данной модели универсальными, т. е. не зависящими от концентрации примесей вплоть до порога перколяции, или существует линия фиксированных точек, определяющая непрерывное изменение критических индексов с концентрацией. Кроме того, обратим внимание на то, что есть серьезные основания предполагать наличие зависимости критических параметров от способа реализации беспорядка в исследуемой модели. В работе [19] было обнаружено, что беспорядок, реализованный каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов), ведет к результатам, отличным от случая, когда беспорядок реализовался способом большого канонического типа (доля магнитных узлов в каждой примесной конфигурации флюктуирует). По-видимому, строгое исследование таких закономерностей в ближайшее время возможно лишь на основе данных численного эксперимента и практически невозможно другими методами.

*E-mail: m_akai@iwt.ru

Ренормгрупповой анализ с использованием ε -разложения [8] выявил, что критическое поведение 3D-модели Изинга с вмороженным беспорядком описывается критическими показателями, отличающимися от показателей чистой модели Изинга. Однако асимптотическая сходимость рядов ε -разложения для неупорядоченных магнетиков еще более слабая, чем для чистых систем, и предсказания, сделанные на основе применения метода ε -разложения, не являются надежными [6, 14].

Современные экспериментальные исследования сталкиваются с большими трудностями при попытке вычислить критические параметры и определить класс универсальности статического критического поведения таких систем [2, 3]. Имеющиеся в литературе на сегодняшний день экспериментальные результаты не позволяют сформировать цельной и непротиворечивой картины критического поведения примесных систем. Дело в том, что результаты экспериментальных исследований сильно зависят не только от метода и конкретного образца, но и от способа приготовления образца (см. ссылки в [13]). Кроме того, практически нет экспериментальных исследований, выполненных на основе единого методического подхода на сериях однотипных образцов при строго контролируемом содержании примесей. Это привело к тому, что фазовые переходы и критические явления в разбавленных системах в настоящее время интенсивно исследуются различными вариантами метода Монте-Карло (МК), в том числе и мощными кластерными алгоритмами [14, 15, 17–21]. Кластерными алгоритмами метода МК до сих пор в основном изучались системы, разбавленные большим каноническим способом. Значительно менее исследованы системы, разбавленные каноническим способом.

В данной работе нами методом МК выполнены исследования статического критического поведения модели Изинга с вмороженным беспорядком на кубической 3D-решетке. Огромный интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, изинговская слаборазбавленная система с вмороженным беспорядком имеет большой практический интерес, так как позволяет на уровне простейшей модели включать в рассмотрение макроскопические эффекты беспорядка, всегда присутствующие в реальных материалах.

Во-вторых, исследование влияния замороженного беспорядка на универсальные характеристики критического поведения, помимо практического, имеет и большой академический интерес [5].

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

2. МОДЕЛЬ ИЗИНГА С ВМОРОЖЕННЫМ БЕСПОРЯДКОМ

Трехмерная слаборазбавленная модель Изинга с вмороженным беспорядком представлена на рис. 1. В рассматриваемой нами модели примеси распределены каноническим способом. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности.

1. В узлах кубической решетки расположены спины S_i , принимающие значения $S_i = \pm 1$, и немагнитные примеси (вакансии). Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки.

2. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если оба узла заняты магнитными атомами.

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \rho_i S_i \rho_j S_j, \quad (1)$$

где

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин,} \\ 0, & \text{если в узле расположена} \\ & \text{немагнитная примесь.} \end{cases}$$

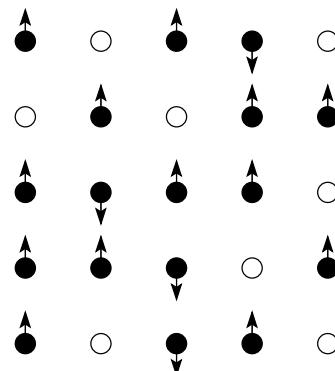


Рис. 1. Слаборазбавленная модель Изинга с замороженными немагнитными примесями

Концентрация магнитных спинов определяется суммированием абсолютного значения спина во всех узлах решетки:

$$p = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} \rho_i |S_i|. \quad (2)$$

Тогда значение $p = 1$ соответствует чистой модели Изинга, а $p = 0$ — пустой, чисто примесной решетке.

3. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Кластерные алгоритмы метода МК [22, 23] оказались мощными и весьма эффективными инструментами исследования критических явлений в различных системах и моделях [19–21, 24, 25]. Критические параметры, рассчитанные на основе данных, полученных с помощью кластерных алгоритмов, обладают высокой точностью и надежностью [21, 24, 25]. Из всех вариантов кластерных алгоритмов метода МК наиболее эффективным на сегодняшний день является алгоритм Вольфа [22]. Этот алгоритм был использован нами в следующем виде.

1. Три случайных числа задают координаты i, j, k узла на решетке. Если в этом узле находится немагнитная примесь, то генерируются новые случайные числа до тех пор, пока не будут сгенерированы координаты магнитного спина S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят магнитным спином, то с вероятностью $P = 1 - \exp(-2K)$, где $K = J/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, устанавливается связь между S_i и S_j , если S_i и S_j имеют одинаковые значения при $J > 0$.

Затем начинается просмотр ближайших соседей последнего спина, с которым была установлена связь. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты границы системы.

3. Все спины, между которыми установлена связь, образуют «кластер».

4. Полученный кластер переворачивается с вероятностью равной единице.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и с концентрацией спинов $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.8, 0.6$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20\text{--}60$.

Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси z . Для вывода системы $p = 1.0$ в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $2 \cdot 10^6$ шагов Монте-Карло на

спин (здесь 1 МК-шаг/спин — это один переворот кластера) и осуществлялось усреднение по 5 различным начальным конфигурациям. Для систем с концентрацией магнитных узлов $p = 0.95, 0.9, 0.8, 0.6$ отсекаемый участок составлял соответственно $3 \cdot 10^6$, $4 \cdot 10^6$, $5 \cdot 10^6$, $6 \cdot 10^6$ МК-шагов/спин, а усреднение выполнялось по 20–80 различным конфигурациям примесей. С уменьшением концентрации магнитных узлов следует учесть, что одновременно растут флуктуации в распределении примесей по решетке, а это, в свою очередь, требует и увеличения числа примесных конфигураций с различной реализацией беспорядка для усреднения различных термодинамических параметров. Заметим, что моделирование решеток большого размера требует существенного увеличения объема вычислений для каждой примесной конфигурации.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались флуктуационные соотношения [26]

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

$$\chi = (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (4)$$

где $K = |J|/k_B T$, $N = pL^3$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m — намагниченность системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

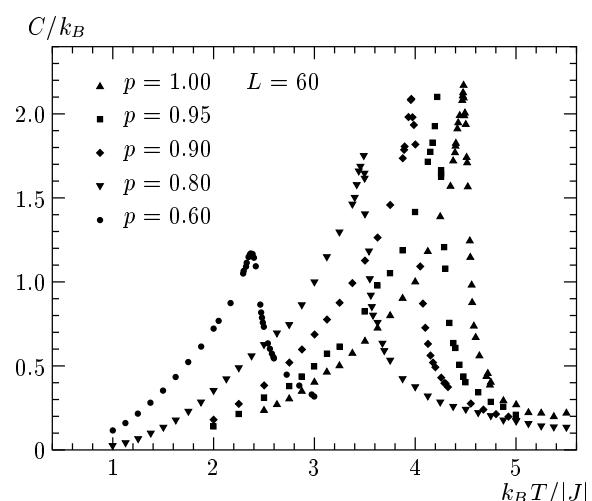


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости для разбавленной трехмерной модели Изинга

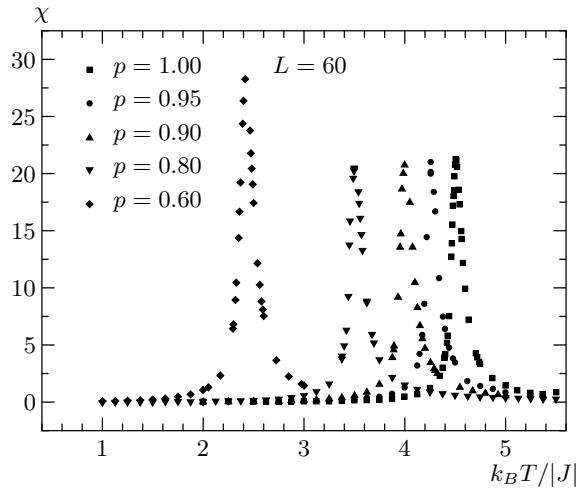


Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости для разбавленной трехмерной модели Изинга

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для систем с концентрацией магнитных узлов $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.8, 0.6$. Здесь и далее погрешность данных не превышает размеров символов на рисунках. Как видно на рис. 2, наличие немагнитных примесей приводит к сглаживанию максимумов теплоемкости и их уменьшению с ростом концентрации немагнитных атомов c , где $c = 1 - p$, что является характерной чертой разбавленных трехмерных изинговских магнетиков [16, 17]. Отметим также, что в критической области восприимчивость (рис. 3) имеет ярко выраженные максимумы при всех значениях концентраций p .

Для определения критической температуры $T_c(p)$ нами использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [27]:

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle}{3\langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (5)$$

где m — намагниченность системы с линейным размером L . Для нахождения T_c необходимо определить температурную зависимость кумулянта $U_L(T, p)$, усредненного по примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка для нескольких размеров решетки (L_1, L_2, \dots, L_n). Критическая температура T_c определяется как значение температуры, при котором усредненное значение кумулянта не зависит от линейных размеров решетки $U_{L_1}(T_c, p) = U_{L_2}(T_c, p) = \dots = U_{L_n}(T_c, p)$. Определенные таким образом критические температуры приведены в таблице. Характерная зависимость усредненных кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ от

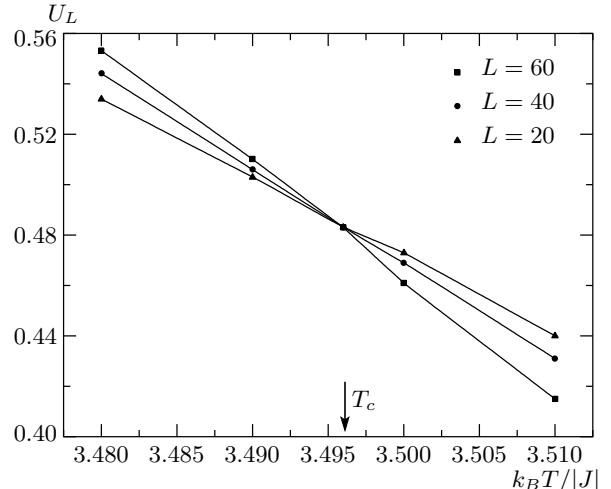


Рис. 4. Зависимость усредненных по примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка кумулянтов U_L от температуры для системы с $p = 0.8$

температуры для систем с разными линейными размерами при концентрации $p = 0.8$ показана на рис. 4. Точка пересечения этих кривых соответствует критической температуре $T_c = 3.4956(6)$.

На рис. 3 видно, что пики восприимчивости для систем с разными значениями концентраций p в пределах погрешности совпадают с критическими температурами $T_c(p)$, определенными методом кумулянтов Биндера, что говорит о высокой надежности определения критической температуры.

Для определения статических критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ и намагниченности β использовалась теория конечно-размерного скейлинга. Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре T , близкой к критической температуре T_c бесконечно большой системы, может быть представлена в виде [28]

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (6)$$

где $t = |T - T_c|/T_c$, $T_c = T_c(L = \infty)$, ν — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$). Уравнение (6) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящихся на один спин,

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (7)$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (8)$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (9)$$

Критические индексы трехмерной модели Изинга с вмороженным беспорядком, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга

p	$k_B T_c / J $	ν	α	γ	β
1.00	4.5106(6)	0.624(2)	0.108(2)	1.236(2)	0.322(2)
0.95	4.2591(4)	0.646(2)	-0.010(2)	1.262(2)	0.306(3)
0.90	4.0079(8)	0.664(3)	-0.014(3)	1.285(3)	0.308(3)
0.80	3.4956(6)	0.683(4)	-0.016(3)	1.299(3)	0.310(3)
0.60	2.4173(9)	0.725(6)	-0.093(7)	1.446(4)	0.349(4)

где α, γ, β — статические критические индексы для системы с $L = \infty$, связанные соотношением гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [29].

Кроме того, в настоящее время на основе теории конечно-размерного скейлинга предложен целый ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции ν [30, 31]. В соответствии с этой теорией в точке фазового перехода выполняется соотношение

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (10)$$

где g_{V_n} — некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2), \quad (11)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \times \\ \times \left[\langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (12)$$

где $\beta = 1/T$, T — температура.

Из соотношений (8), (9) следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим выражениям:

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

$$m \propto L^{-\beta/\nu}. \quad (14)$$

Эти соотношения были использованы нами для определения величин γ и β . Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работе [24]. Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L , как правило, используются другие выражения, например [19, 26]

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (15)$$

где A — некоторый коэффициент.

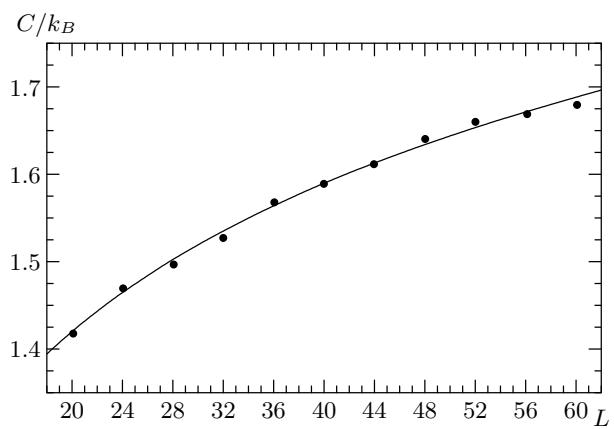


Рис. 5. Зависимость теплоемкости C от линейных размеров системы L при концентрации спинов $p = 0.8$

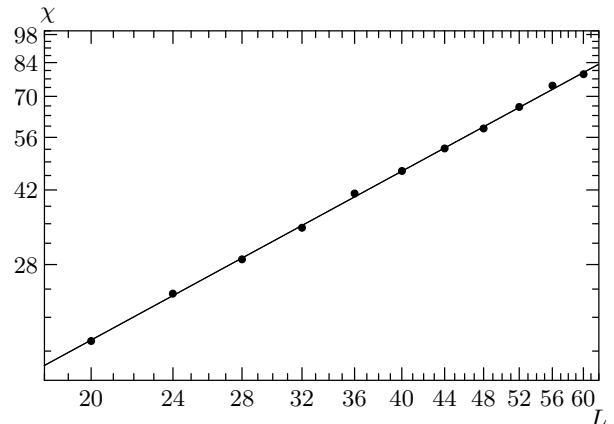


Рис. 6. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при концентрации спинов $p = 0.8$

Для расчета критических индексов α , β , γ и ν строились зависимости C , m , χ и V_n от L . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения α/ν , β/ν , γ/ν и $1/\nu$. Затем с помощью значений ν , полученных в рамках данного исследования, определялись величины α , β и γ . Следует отметить, что во многих численных исследованиях неупорядоченных систем, в отличие от нашей, эти индексы в основном определялись с помощью критического индекса ν , полученного на основе различных скейлинговых соотношений. На рис. 5 и 6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для концентрации $p = 0.8$. Как видно на рис. 6, полученные данные для восприимчивости не отклоняются от прямой даже при малых значениях L , что нередко наблюдается в других работах [19]. При исследовании таких систем часто возникает вопрос о достижении режима асимптотического критического поведения. Очевидно, для восприимчивости при $p = 0.8$ использованное нами для усреднения количество примесных конфигураций и размеры $L \geq 20$ изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима. Соблюдение этих условий обеспечивалось и для всех других изученных систем.

Как уже отмечалось, при обработке данных по теплоемкости на практике используется выражение (15), а не (7). Наши данные для теплоемкости при $p = 0.8$ свидетельствуют в том, что зависимость $C(L)$ в двойном логарифмическом масштабе не является линейной (рис. 5).

Таким образом, значения критических индексов для различных значений p , полученные при соответствующем $\nu(p)$, представлены в таблице, откуда видно, что численные значения критических индексов, полученные на основе однокластерного алгоритма Вольфа по методу МК при исследовании примесной трехмерной системы, свидетельствуют о том, что в рассмотренном интервале концентраций p критические индексы отличаются от соответствующих значений, характерных для чистой системы. Незначительную концентрационную зависимость критических индексов для слаборазбавленной системы ($p \geq 0.8$), по-видимому, можно интерпретировать наличием кроссовера при переходе от чистой системы к разбавленной. Следует отметить, что критический индекс теплоемкости α при $p = 0.95$ изменяет знак с положительного на отрицательный и в пределах погрешности совпадает с теоретическим значением,

полученным в работе [7].

При сильном разбавлении ($p = 0.6$) наблюдается значительное увеличение абсолютных значений соответствующих индексов. Такое поведение критических индексов в сильноразбавленном режиме может быть обусловлено наличием иной случайной неподвижной точки, которую трудно обнаружить в численных экспериментах. Очевидно, что если такая точка существует, она будет характеризоваться новым набором критических индексов. В качестве экспериментального подтверждения такого характера критического поведения можно рассматривать результаты работы [2]. Полученные в этой работе критические индексы для разбавленных магнетиков $\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$ с $p = 0.6, 0.5$ практически совпадают с критическими индексами, определенными нами при $p = 0.6$.

Наблюдаемый характер критического поведения при сильном разбавлении, $p = 0.6$, в рамках данного исследования находится в хорошем соответствии с предположениями о влиянии иной «переключационной» неподвижной точки, высказанными в работах [14, 18]. Отметим также, что найденные нами значения критических индексов α , γ и β при $p = 1.0$ прекрасно согласуются со значениями $\alpha = 0.109(4)$, $\gamma = 1.2396(13)$ и $\beta = 0.3258(14)$, полученными в работе [12] пересуммированием рядов теории возмущений скалярной $d = 3$ теории φ^4 для системы в отсутствие структурного беспорядка.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данные нашей статьи, полученные в результате тщательных исследований, проведенных с соблюдением единой методики, на трехмерной разбавленной модели Изинга с немагнитными примесями (определенные каноническим способом), свидетельствуют о том, что

1) класс универсальности данной модели при малых концентрациях ($p \geq 0.8$) примесей характеризуется новым набором критических индексов и этот набор отличается от соответствующего для чистой модели Изинга ($p = 1.0$);

2) сильноразбавленные системы ($p \leq 0.6$) характеризуются другим набором критических индексов и образуют свой класс универсальности.

Очевидно, что в таком случае существует и две кроссоверные области:

1) область между чистой ($p = 1.0$) и слаборазбавленными ($p \geq 0.8$) системами;

2) область между слаборазбавленной ($p \approx 0.8$) и сильноразбавленной ($p \leq 0.6$) системами.

Возможно, противоречивый характер и несогласованность большинства результатов исследований, посвященных изучению этой модели, объясняются наличием и растянутостью таких кроссоверных областей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-02-16487), научной школы (НШ-2253.2003.2), ФЦП «Интеграция» (грант № И0228) и гранта Фонда содействия отечественной науке (А. К. Муртазаев).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. W. Mitchell, R. A. Cowley, H. Yoshizawa et al., Phys. Rev. B **34**, 4719 (1986).
2. R. J. Birgeneau, R. A. Cowley, G. Shirane et al., Phys. Rev. B **27**, 6747 (1983).
3. J. Yoon and M. H. Chan, Phys. Rev. Lett. **78**, 4801 (1997).
4. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
5. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
6. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. А. Федоренко, ФТТ **43**, 1688 (2001).
7. И. О. Майер, А. И. Соколов, ФТТ **26**, 3454 (1984).
8. Д. Е. Хмельницкий, ЖЭТФ **68**, 1960 (1975).
9. Yu. Holovatch and T. Yavors'kii, J. Stat. Phys. **92**, 785 (1998).
10. А. И. Соколов, Б. Н. Шалаев, ФТТ **23**, 2058 (1981).
11. B. N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994).
12. R. Guida and J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31**, 8103 (1998).
13. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
14. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, ЖЭТФ **103**, 962 (1993).
15. K. Hukushima, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 631 (2000).
16. С. С. Аплеснин, ФТТ **26**, 3355 (1984).
17. H.-O. Heuer, Phys. Rev. B **42**, 6476 (1990).
18. H.-O. Heuer, J. Phys. A **22**, L333 (1993).
19. S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998).
20. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor et al., Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
21. О. В. Васильев, Л. Н. Шур, ЖЭТФ **117**, 1110 (2000).
22. U. Wolf, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
23. J.-S. Wang and R. H. Swendsen, Physica A **167**, 565 (1990).
24. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **120**, 1535 (1999).
25. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. А. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
26. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, (1991).
27. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
28. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
29. А. З. Паташинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
30. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
31. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).