Письма в ЖЭТФ, том 60, вып.1, стр.24 - 29 ©1994 г. 10 июля

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ДВУМЕРНЫХ ИЗИНГОВСКИХ СИСТЕМ

О.Н.Марков, В.В.Прудников

Омский государственный университет

644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 1994 г.

Осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в двумерной модели Изинга с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси. Рассмотрена квадратная решетка с размерами 400^2 с концентрацией спинов $p = 1,0$; 0,95; 0,9; 0,85; 0,8; 0,75; 0,7. Для определения динамического критического индекса z использован метод Монте-Карло совместно с методом динамической ренормгруппы. Получены значения $z(p)$: $z(1) = 2,24 \pm 0,07$; $z(0,95) = 2,24 \pm 0,06$; $z(0,9) = 2,24 \pm 0,06$; $z(0,85) = 2,38 \pm 0,05$; $z(0,8) = 2,51 \pm 0,06$; $z(0,75) = 2,66 \pm 0,07$; $z(0,7) = 2,88 \pm 0,06$. Выявлено сингулярное скейлинговое поведение индекса $z = A' \cdot |\ln(p - p_c)| + B'$ с константами $A' = 0,56 \pm 0,07$, $B' = 1,62 \pm 0,07$.

В соответствии с гипотезой динамического скейлинга [1] при приближении температуры T системы к критической температуре T_c такие характеристики критического поведения как время релаксации τ и корреляционная длина ξ_T термических долгоживущих возбуждений системы оказываются связанными соотношением

$$\ln \tau = f(\ln \xi_T), \tag{1}$$

где $f(x)$ является обобщенной однородной функцией своего аргумента x. Для большинства изученных к настоящему времени критических явлений время релаксации систем удовлетворяло соотношению (1) с функцией $f(x) = zx$ с не зависящей от температуры константой z, называемой динамическим критическим индексом. В результате при $T \to T_c$ система характеризовалась критическим замедлением времени релаксации с

$$\tau \sim \xi_T^z \sim |T - T_c|^{-z\nu_T}, \tag{2}$$

где ν_T – критический индекс корреляционной длины, задающий ее расходимость при критической температуре. Как показали исследования, численные значения критических индексов, завися от пространственной размерности системы d и числа компонент параметра порядка, являются универсальными для целого ряда систем. Разбиение систем, демонстрирующих фазовые превращения самой различной природы, на классы универсальности равновесного [2] и динамического [1] критического поведения позволило придать теории фазовых переходов и критических явлений необычайную стройность. Изучение критического поведения неупорядоченных магнитных систем со случайно распределенными немагнитными атомами примеси позволило расширить представление о факторах, влияющих на систематизацию по классам универсальности [3]. Исследования показали [4], что присутствие замороженных примесей изменяет свойства магнетиков, теплоемкость которых в однородном состоянии испытывает расходимость в критической точке с индексом $\alpha > 0$.

Данному критерию удовлетворяют только трехмерные системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга. Ренормгрупповой анализ с использованием ϵ-разложения [5, 6] выявил, что критическое поведение неупорядоченной модели Изинга характеризуется новым набором критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных примесей c_{imp} в области с $c_{imp} \ll 1 - p_c$, где p_c – порог спиновой перколяции. В работах [7, 8] проведен анализ равновесного, а в работе одного из авторов [9] динамического критического поведения разбавленных магнетиков непосредственно для трехмерных систем. Эксперимент [10] подтвердил численное отличие статических критических индексов для примесных систем от их значений для однородных магнетиков и показал хорошее согласие с теоретическими результатами.

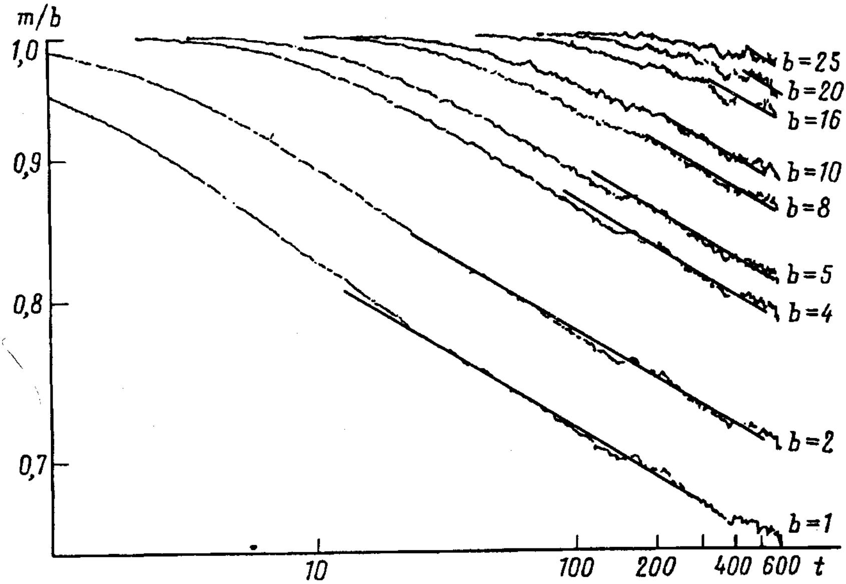
Особенный интерес для исследователей представляют неупорядоченные низкоразмерные магнетики, описываемые моделью Изинга. Из-за равенства нулю индекса теплоемкости α однородной модели влияние беспорядка, вносимого присутствием примеси, становится неопределенным. Детальное рассмотрение этого случая [11, 12] позволило прийти к выводу, что влияние примеси затрагивает только поведение теплоемкости, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения. Теоретико-полевое рассмотрение релаксационного режима критической динамики неупорядоченных двумерных изинговски-подобных магнетиков показало [9], что оно не отличается от динамики однородной модели в области с $c_{imp} \ll 1 - p_c$ и характеризуется индексом $z = 2,277$. Однако остался невыясненным вопрос: являются ли критические индексы неупорядоченных систем универсальными, то есть не зависящими от концентрации примеси вплоть до порога перколяции, или существует линия фиксированных точек, определяющая непрерывное изменение критических индексов с концентрацией.

В критическом поведении неупорядоченных систем необходимо особенно отметить область высоких концентраций примеси, близких к порогу перколяции. В ряде работ [13–15] были высказаны идеи нарушения при перколяционной концентрации спинов стандартной формы динамического скейлинга (1) с $f(x) = zx$ и универсальным динамическим индексом z. Предполагается, что при $p = p_c$ реализуется сингулярное динамическое скейлинговое поведение (1) с $f(x) = Ax^2 + Bx + C$. При этом может быть введен зависящий от температуры эффективный динамический индекс $z(\tau \sim \xi^z)$ в виде

$$z = A \cdot \ln \xi_T + B \tag{3}$$

с $z \to \infty$ при $\xi_T \to \infty$ $(T \to 0,\ p = p_c)$. Подобная форма индекса z позволяет объяснить аномально большое его значение, измеренное при рассеянии нейтронов [16] в $Rb_2(Mg_{0,41}Co_{0,59})F_4$. К настоящему времени в ряде работ по компьютерному моделированию критической динамики неупорядоченных систем при $p = p_c$ и вблизи порога перколяции [17–20] получено подтверждение квадратичной формы скейлинговой функции $f(x)$ для логарифма времени релаксации.

В предлагаемой работе осуществлено компьютерное моделирование методом Монте-Карло критической динамики двумерной модели Изинга как в однородном случае, так и с концентрацией спинов $p = 0,95$; 0,9; 0,85; 0,8; 0,75; 0,7. Данное исследование критической динамики неупорядоченных систем впервые проведено в столь широком интервале изменения концентрации примеси, что позволило ответить на вопрос о степени универсальности динамического индекса двумерной модели Изинга и области концентраций, в которой начинают проявляться динамические эффекты аномального перколяционного поведения.



Изменение исходной m_1 и перенормированных m_b намагниченностей от времени (единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин) для однородной модели Изинга. Темными отрезками изображены интервалы изменения Δm_b, соответствующие степенному характеру критической релаксации $m_b(t)$ [23]. По точкам этих интервалов в соответствии с (7) осуществлялась процедура определения средних значений z_b для различных b при $b' = 1$

Неупорядоченная модель Изинга задавалась как система спинов $S_i = \pm 1$ с концентрацией p, связанных с $N = pL^2$ $(L = 400)$ узлами квадратной решетки. Это дает $p \cdot 2^N$ возможных конфигураций $\{S\}$ с энергией

$$E = -J \sum_{i,j} p_i p_j S_i S_j, \tag{4}$$

где суммирование осуществляется по всем ближайшим парам спинов, J характеризует энергию их взаимодействия, p_i – случайные переменные, описываемые функцией распределения

$$P(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p)\delta(p_i) \tag{5}$$

и характеризующие распределенные по узлам решетки замороженные немагнитные атомы примеси (пустые узлы). Рассматривалась ферромагнитная система с $J > 0$. Использование алгоритма Метрополиса, состоящего в случайном выборе спина S_i и его перевороте с вероятностью, задаваемой функцией

$$W(S \to S') = \begin{cases} \exp(-\Delta E_{SS'}/kT) & \text{при} \quad \Delta E_{SS'} > 0 \\ 1 & \text{при} \quad \Delta E_{SS'} \le 0 \end{cases}, \tag{6}$$

где $W(S,S')$ определяет вероятность перехода системы из микроскопического состояния с конфигурацией спинов $\{S\}$ к состоянию с конфигурацией $\{S'\}$, позволяет непосредственно реализовать динамику модели Изинга с релаксацией намагниченности

$$m_s(t) = \sum_i^N S_i/N$$

к равновесному значению, определяемому температурой термостата T. Можно связать шкалу времени t со шкалой $\{S\}$ последовательных конфигураций, считая, что N случайных выборок узлов системы осуществляется за единицу времени. Данная единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин. При моделировании критической динамики начальное состояние системы выбирается, когда все спины параллельны ($m_s = 1$), а температура системы равна критической. Критическая температура T_c для неупорядоченных систем является функцией концентрации примеси, понижаясь с ее ростом и обращаясь в нуль при пороговой концентрации $c_{imp} = 1 - p_c$. Для квадратной решетки изинговских спинов $p_c \cong 0,59$, а $T_c(p)$ равны [21]: $T_c(1,0) \simeq 2,2692$, $T_c(0,95) \simeq 2,0883$, $T_c(0,9) \simeq 1,9004$, $T_c(0,85) \simeq 1,7071$, $T_c(0,8) \simeq 1,5079$, $T_c(0,75) \simeq 1,2921$, $T_c(0,7) \simeq 1,0751$ в единицах J/k. В данной работе для определения динамического индекса z использован метод Монте-Карло совместно с методом динамической ренормгруппы [22]. Для этого осуществлялась процедура блочного разбиения системы, когда блок b^d соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым направлением большинства спинов в блоке. Переопределенная система спинов образует новую решетку с намагниченностью m_b. Если намагниченность исходной решетки в процессе релаксации достигает некоторого значения m_1 за время t_1, а переопределенная система достигает того же значения m_1 за время t_b, то использование двух систем после блочного разбиения с размерами блоков b и b' и определение промежутков времени t_b и $t_{b'}$, по истечении которых их намагниченности m_b и $m_{b'}$ достигнут одного и того же значения m_1, позволяет определить динамический индекс z из соотношения

$$t_b/t_{b'} = (b/b')^z \quad \text{или} \quad z = \ln(t_b/t_{b'})/\ln(b/b') \tag{7}$$

в пределе достаточно больших b и $b' \to \infty$. Этот алгоритм был применен нами к однородной и примесным системам с размерами 400^2 и приведенными выше концентрациями спинов. Для систем с $p \geq 0,9$ осуществлялась процедура моделирования релаксации из 1000 шагов Монте-Карло на спин при 10–15 прогонках с различными конфигурациями примесей, по которым и проводилось усреднение зависимостей $m_b(t)$. Для систем с $p = 0,85$; 0,8; 0,75; 0,7 процедура моделирования релаксации состояла соответственно из 2000, 4000, 8000, 16000 шагов Монте-Карло на спин при 30 прогонках с различными конфигурациями примесей. Последнее обусловлено тем, что по мере приближения к порогу перколяции возрастают флуктуации в распределении примесей по решетке, а это требует и увеличения числа примесных конфигураций для усреднения зависимостей $m_b(t)$. Размер системы позволял осуществить разбиение на блоки с размерами $b = 2$, 4, 5, 8, 10, 16, 20, 25, 40. Для примера на рисунке приведены графики изменения исходной и перенормированных намагниченностей $m_b(t)$ от времени для однородной системы. На основе соотношений (7) были получены наборы значений индекса z_b, соответствующих различным b (см. таблицу). Выделенная тенденция зависимости z от b позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай $b \to \infty$, предполагая зависимость $z_b = z_{b=\infty} + \text{const}\, b^{-1}$. За деталями методики моделирования критической динамики неупорядоченных систем и определения индекса z мы отсылаем к работе [23]. В результате были получены следующие значения $z(p)$: $z(1) = 2,24 \pm 0,07$, $z(0,95) = 2,24 \pm 0,06$, $z(0,9) = 2,24 \pm 0,06$, $z(0,85) = 2,38 \pm 0,05$, $z(0,8) = 2,51 \pm 0,06$, $z(0,75) = 2,66 \pm 0,07$, $z(0,7) = 2,88 \pm 0,06$. Относительно высокая погрешность значений $z(1)$ и $z(0,95)$ обусловлена более широким набором z_b, использованным для получения экстраполированного индекса $z_{b=\infty}$. В то время как увеличение погрешности для $z(p)$ с $p \leq 0,8$ связано с ростом флуктуаций в распределении примесей и увеличенным в связи с этим числом усредняемых примесных конфигураций.

Значения динамического индекса z_b, полученные по формуле (7), и экстраполированные значения $z_{b=\infty}$ для системы 400^2 с различными концентрациями спинов p

	p						
b	1,0	0,95	0,9	0,85	0,8	0,75	0,7
4	$2,456 \pm$ $\pm 0,068$						
5	$2,454 \pm$ $\pm 0,061$	$2,439 \pm$ $\pm 0,053$					
8	$2,401 \pm$ $\pm 0,047$	$2,394 \pm$ $\pm 0,048$	$2,433 \pm$ $\pm 0,042$				
10	$2,357 \pm$ $\pm 0,036$	$2,366 \pm$ $\pm 0,034$	$2,417 \pm$ $\pm 0,034$	$2,473 \pm$ $\pm 0,040$			
16	$2,305 \pm$ $\pm 0,046$	$2,334 \pm$ $\pm 0,026$	$2,389 \pm$ $\pm 0,041$	$2,469 \pm$ $\pm 0,028$	$2,565 \pm$ $\pm 0,048$	$2,805 \pm$ $\pm 0,051$	
20	$2,285 \pm$ $\pm 0,031$	$2,291 \pm$ $\pm 0,032$	$2,332 \pm$ $\pm 0,031$	$2,461 \pm$ $\pm 0,016$	$2,557 \pm$ $\pm 0,042$	$2,803 \pm$ $\pm 0,056$	$2,954 \pm$ $\pm 0,057$
25	$2,242 \pm$ $\pm 0,029$	$2,252 \pm$ $\pm 0,023$	$2,269 \pm$ $\pm 0,032$	$2,385 \pm$ $\pm 0,029$	$2,547 \pm$ $\pm 0,035$	$2,788 \pm$ $\pm 0,054$	$2,942 \pm$ $\pm 0,048$
40					$2,532 \pm$ $\pm 0,036$	$2,703 \pm$ $\pm 0,035$	$2,912 \pm$ $\pm 0,053$
$z_{b=\infty}$	$2,24 \pm$ $\pm 0,07$	$2,24 \pm$ $\pm 0,06$	$2,24 \pm$ $\pm 0,06$	$2,38 \pm$ $\pm 0,05$	$2,51 \pm$ $\pm 0,06$	$2,66 \pm$ $\pm 0,07$	$2,88 \pm$ $\pm 0,06$

Анализ полученных значений индекса $z(p)$ показывает, что для концентраций $p \geq 0,9$ критическая динамика неупорядоченной двумерной модели Изинга принадлежит к тому же классу универсальности, что и критическая динамика однородной модели с индексом $z = 2,24 \pm 0,07$. Полученное значение индекса хорошо согласуется с результатами теоретико-полевого подхода [9] с $z = 2,277$ и ряда других работ по динамике однородной двумерной модели Изинга: $z = 2,22 \pm 0,13$ [24], 2,23 [25], 2,22 [15], $2,24 \pm 0,04$ [26], хотя существуют и иные результаты с $z = 2,125 \pm 0,010$ [27], $2,14 \pm 0,02$ [28], $2,13 \pm 0,03$ [29].

Для систем с концентрациями спинов $p \leq 0,85$ было обнаружено увеличение динамического индекса z по мере уменьшения p. Данные изменения $z(p)$ могут быть интерпретированы как результат проявления кроссоверных эффектов перколяционного поведения. Было выявлено, что зависимость индекса z от p для $p = 0,7$; 0,75; 0,8; 0,85 хорошо описывается логарифмической функцией

$$z = A' |\ln(p - p_c)| + B' \tag{8}$$

с $A' = 0,56 \pm 0,07$, $B' = 1,62 \pm 0,07$. Полученная зависимость (8) может быть сопоставлена с аномальной скейлинговой зависимостью (3) для эффективного динамического индекса z при $\xi_T \cong \xi_p = \xi_0(p-p_c)^{-\nu_p}$ и $A' = A\nu_p$, $B' = B + A\ln\xi_0$, где ν_p – индекс корреляционной длины ξ_p для явления перколяции. Равенство $\xi_T \cong \xi_p$ соответствует условиям проводимого компьютерного эксперимента при $T = T_c(p)$ и p, близких к p_c, так как при использовании ряда известных соотношений для модели Изинга может быть получено, что $\xi_T/\xi_p \cong \exp[2J\nu_T(T-T_c)/kTT_c]$ при $p \to p_c$ и $T \to T_c(p)$. Сравнение с результатами исследования методом Монте-Карло зависимости времени релаксации τ от температуры [18] при $p = p_c$ $(A = 0,62 \pm 0,12)$ и от концентрации p при $p < p_c$ [19] $(A = 0,48)$ показывает, что получаемое нами значение $A = 0,42 \pm 0,07$ при $\nu_p = 4/3$ хорошо согласуется с результатами работы [19].

Таким образом, в данной работе получено подтверждение сингулярного динамического скейлингового поведения вблизи порога перколяции, эффекты которого начинают проявляться для двумерной модели Изинга при концентрациях спинов $p \leq 0,85$. В данном явлении нашло свое отражение общее свойство динамического поведения примесных систем в длинноволновом пределе, которое в отличие от статического характеризуется другими локальными законами сохранения в рассеянии спиновых флуктуаций на примесях. В результате в критической динамике присутствие примесей сказывается сильнее, чем при описании равновесных свойств в критической точке.

---

1. P.C.Hohenberg and B.I.Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
2. M.E.Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
3. R.B.Stinchcombe, in Phase Transitions and Critical Phenomena, ed. C.Domb and J.L.Lebowitz, vol.7 (Academic, New York, 1983), p.151.
4. A.B.Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
5. Д.Е.Хмельницкий, ЖЭТФ **68**, 1960 (1975).
6. G.Grinstein, S-k.Ma, and G.F.Mazenko, Phys. Rev. B**15**, 258 (1977).
7. K.E.Newman and E.K.Riedel, Phys. Rev. Б **25**, 264 (1982).
8. G.Jug, Phys. Rev. B **27**, 609 (1983).
9. В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, ЖЭТФ **101**, 1853 (1992).
10. R.J.Birgeneau et al., Phys. Rev. B **27**, 6747 (1983).
11. V.S.Dotsenko and V.S.Dotsenko, J. Phys. C **15**, 495, L557 (1982).
12. G.Jug, Phys. Rev. B **27**, 4518 (1983).
13. C.K.Henley, Phys. Rev. Lett. **54**, 2030 (1985).
14. C.K.Harris and R.B.Stinchcombe, Phys. Rev. Lett. **56**, 869 (1986).
15. E.J.S.Lage, J. Phys. C **19**, L91 (1986).
16. G.Aeppli, H.Guggenheim, and Y.Uemura, Phys. Rev. Lett. **52**, 942 (1984).
17. D.Chowdhury and D.Stauffer, J. Phys. A **19** L19 (1986).
18. S.Jain, J. Phys. A **19**, L667 (1986).
19. B.Biswal and D.Chowdhury, Phys. Rev. A **43**, 4179 (1991).
20. V.B.Andreichenko, W.Selke, and A.L.Talapov, J. Phys. A **25**, L283 (1992).
21. H.-O.Heuer, Europhys. Lett. **16**, 503 (1991).
22. N.Jan, L.L.Moseley, and. D.Stáuffer, J.Stat. Phys. **33**, 1 (1983).
23. В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, ЖЭТФ **103**, 962 (1993).
24. J.Tobochnik, S.Sarker, and R.Cordery, Phys. Rev. Lett. **46**, 1417 (1981).
25. S.L.Katz, J.D.Gunton, and C.P.Liu, Phys. Rev. B **25**, 6008 (1982).
26. P.H.Poole and N.Jan, J.Phys. A **23**, L453 (1990).
27. Z.Racz and M.F.Collins, Phys. Rev. B **13**, 3074 (1976).
28. C.Kalle, J. Phys. A **17**, L801 (1984).
29. J.K.Williams, J.Phys. A **18**, 49 (1985).