Письма в ЖЭТФ, том 55, вып.12, стр.709 - 712 25 июня 1992 г.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНЕТИКОВ

А.Н.Вакилов, В.В.Прудников

Омский государственный университет
644077, Омск

Поступила в редакцию 21 мая 1992 г.

В данной работе осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной модели Изинга с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси. Рассмотрена система с размерами 48^3 с концентрацией примеси $p = 0,05$; 0,2; 0,4; 0,6. Для определения динамического критического индекса z использован метод Монте–Карло совместно с методом динамической ренормгруппы. Определены значения $z(p)$: $z(0,05) = 2,19 \pm 0,07$, $z(0,2) = 2,20 \pm 0,08$, $z(0,4) = 2,58 \pm 0,09$, $z(0,6) = 2,65 \pm 0,12$. Предложена гипотеза ступенчатой универсальности критических индексов трехмерных разбавленных магнетиков.

В последние два десятилетия усилия многих исследователей были направлены на понимание того, как примеси и другие дефекты структуры сказываются на поведении различных систем при фазовых переходах. Особенно интересно влияние замороженных примесей, чье присутствие проявляется как возмущение локальной температуры и имеет случайный характер. Исследования показали [1], 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 системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга.

Ренормгрупповой анализ с использованием ϵ-разложения [2,3] выявил, что критическое поведение примесных систем характеризуется новым набором критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных примесей p в области $p \ll p_c$, где p_c – порог спиновой перколяции. Однако асимптотическая сходимость рядов ϵ-разложения для разбавленных магнетиков еще более слабая, чем для однородных. В работах [4,5] проведен анализ равновесного, а в работе авторов [6] динамического критического поведения разбавленных магнетиков непосредственно для трехмерных систем. Эксперимент [7] подтвердил численное отличие статических критических индексов для примесных систем от их значений для однородных магнетиков и показал хорошее согласие с теоретическими результатами. По критической динамике разбавленных магнетиков отсутствуют экспериментальные работы. Остался невыясненным и вопрос: являются ли критические индексы примесных систем универсальными, то есть не зависящими от концентрации примесей вплоть до порога перколяции, или существует линия фиксированных точек, определяющая непрерывное изменение критических индексов с концентрацией.

Компьютерное моделирование критических явлений в настоящее время становится альтернативой реальному физическому эксперименту. В работах [8,9], посвященных моделированию разбавленной модели Изинга, наблюдалось непрерывное изменение эффективного критического индекса β для намагниченности с изменением концентрации примеси, в то время как в работе [10] подтверждается концепция универсальности критических индексов в рамках погрешности определенных значений для индексов восприимчивости γ и корреляционной длины ν при концентрациях примеси $p = 0,2$; 0,4; 0,6.

В предлагаемой работе осуществлено компьютерное моделирование методом Монте–Карло критической динамики трехмерной модели Изинга как в однородном случае, так и с концентрацией примеси $p = 0,05$; 0,2; 0,4; 0,6. Есть основания полагать, что из-за специфических законов сохранения влияние замороженных примесей в критической динамике проявится наиболее ярко по сравнению с влиянием на равновесные свойства. Модель Изинга задается системой спинов S_i, связанных с $N = L^d$ узлами d-мерной решетки (L – характерный размер решетки). Спин может принимать значения $S_i = \pm 1$. Это дает 2^N возможных конфигураций $\{S\}$ с энергией

$$E = -J\sum_{i,j} S_i S_j - h\sum_i S_i, \tag{1}$$

где первая сумма берется по всем ближайшим парам спинов, J характеризует энергию их взаимодействия, h – внешнее поле, связанное со спинами. Будем рассматривать ферромагнитную систему с $J > 0$. Динамику модели Изинга принято описывать функцией условной вероятности $P_s(t) \equiv P(\{S\}, t)$, для которой задается кинетическое уравнение Глаубера

$$\frac{dP_s}{dt} = -P_s(t)\sum_{s'} W(S \to S') + \sum_{s'} W(S' \to S)P_{s'}(t), \tag{2}$$

где $W(S \to S')$ определяет вероятность перехода системы из микроскопического состояния, задаваемого конфигурацией спинов $\{S\}$, к состоянию с конфигурацией $\{S'\}$. Чтобы марковский процесс, описываемый уравнением (2), обладал свойством сходимости к равновесному состоянию гиббсовского ансамбля с $P_s = \exp(-E_s/kT)$, необходимо потребовать выполнения условия детального баланса $W(S \to S')P_s = W(S' \to S)P_s$. Данное соотношение не определяет функцию W однозначно. Обычно W выбирают в виде функции Метрополиса

$$W(S \to S') = \begin{cases} \exp(-\Delta E_{ss'}/kT), & \text{при } \Delta E_{ss'} > 0 \\ 1, & \text{при } \Delta E_{ss'} \le 0 \end{cases} \tag{3}$$

или в виде функции Глаубера

$$W(S \to S') = \exp(-\Delta E_{ss'}/kT)/[1 + \exp(-\Delta E_{ss'}/kT)]. \tag{4}$$

Соотношение $< A(t) >= \Sigma A_s P_s(t)$ задает динамическую эволюцию величины A_s посредством зависимости $P_s(t)$ – решения уравнения (2).

Использование алгоритма Метрополиса, состоящего в случайном выборе спина S_i и его перевороте с вероятностью, задаваемой функцией W в (3), 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 разбавленных магнетиков является функцией концентрации примеси p, понижаясь с ростом p и обращаясь в нуль при пороговой концентрации p_c. Для кубической решетки изинговских спинов $p_c \simeq 0,69$, а $T_c(0) \simeq 4,5108$; $T_c(0,05) \simeq 4,2571$, $T_c(0,2) \simeq 3,4959$; $T_c(0,4) \simeq 2,4178$; $T_c(0,6) \simeq 1,2066$ [10] в единицах J/k. В данной работе для определения динамического индекса z, характеризующего критическое замедление времени релаксации системы

$t_c \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, использован метод Монте–Карло совместно с методом динамической ренормгруппы [11]. 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. Пусть 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. Тогда 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

$$t_b/t_{b'} = (b/b')^z \quad \text{или} \quad z = \ln(t_b/t_{b'})/\ln(b/b') \tag{5}$$

в пределе достаточно больших b и $b' \to \infty$. Этот алгоритм был применен нами к однородной и примесным системам с размерами 48^3 и приведенными выше концентрациями замороженных примесей (примеси – пустые узлы решетки, разбросанные с вероятностью p). Для каждой из систем осуществлялась процедура моделирования релаксации из 1000 шагов Монте–Карло на спин при 20–30 прогонках с различными конфигурациями примесей, по которым и проводилось усреднение зависимостей $m_b(t)$. Размер системы позволял осуществить разбиение на блоки с размерами $b = 2, 3, 4, 6, 8, 12$. При этом блок b^d заменялся спином, если в нем осуществлялось спиновое протекание, или примесью в противном случае. На основе соотношений (5) были получены наборы значений индекса z_b, соответствующих различным b. Выделенная тенденция зависимости z от b позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай $b \to \infty$, предполагая зависимость $z_b = z_{b=\infty} + \mathrm{const}\, b^{-1}$. В результате получены следующие значения: для однородной системы $z(0) = 1,97 \pm 0,08$, для примесных систем $z(0,05) = 2,19 \pm 0,07$; $z(0,2) = 2,20 \pm 0,08$; $z(0,4) = 2,58 \pm 0,09$; $z(0,6) = 2,65 \pm 0,12$. Отсюда видно, что значения динамического индекса для $p = 0,05$ и 0,2 практически совпадают, а для $p = 0,4$ и 0,6 сопоставимы в пределах погрешности их определения. С учетом индекса z для однородной системы полученные значения условно могут быть разделены на три группы, значительно отличающиеся по величине.

Проведем сравнение результатов компьютерного моделирования с результатами применения методов теории критических явлений к однородным и примесным системам. Нами в работе [6] было осуществлено теоретико-полевое описание критической динамики разбавленных магнетиков непосредственно для трехмерного случая. В двухпетлевом приближении с применением техники суммирования Паде–Бореля были получены значения индекса $z(p) = 2,237$, справедливые в области концентраций примеси много меньших порога спиновой перколяции. Аналогичный расчет для однородной изинговской системы, проведенный в трехпетлевом приближении, дал значение $z(0) = 2,014$. Сопоставление теоретических результатов с результатами моделирования показывает их хорошее согласие для однородной системы и примесной системы с $p = 0,05$ и 0,2. Для $p = 0,4$ и 0,6 результаты моделирования демонстрируют существенное увеличение динамического индекса z. Это мы объясняем тем, что для кубической решетки изинговских спинов при $p \geq p_c^{(imp)} \simeq 0,31$ примеси образуют связывающий кластер, который для $T \leq T_c$ сосуществует со спиновым связывающим кластером вплоть до порога спиновой перколяции $p_c^{(s)} = 1 - p_c^{(imp)}$. В результате спиновая корреляционная длина в области $p_c^{(imp)} \leq p \leq p_c^{(s)}$ не является единственным масштабом, определяющим поведение системы вблизи критической температуры $T_c(p)$. Меняется и характер примесного рассеяния длинноволновых флуктуаций намагниченности.

В данной работе предлагается гипотеза ступенчатой универсальности критических индексов для трехмерных разбавленных магнетиков (для двумерных таких эффектов не возникает, так как $p_c^{(imp)} > 0,5$), согласно которой в области разбавления $p \leq p_c^{(s)}$ могут наблюдаться пять типов различного критического поведения: однородное; примесное I при $0 < p < p_c^{(imp)}$ с эффектами влияния точечных примесей; примесное II при $p_c^{(imp)} < p < p_c^{(s)}$ с эффектами влияния протяженной примесной структуры; перколяционное примесное при $p = p_c^{(imp)}$ и перколяционное спиновое при $p = p_c^{(s)}$. Проявление данных типов критического поведения в разбавленных магнетиках ожидается в температурной области $|T - T_c(p)|/T_c(p) \leq (\Delta J/J_0)^{1/\varphi}$, определяемой значением соответствующего индекса "кроссовера" φ и ΔJ – мерой случайности в обменном взаимодействии, для концентраций примеси далеких от пороговых значений и в области $|T - T_c(p)|/T_c(p) \leq \{|p-p_c|/p_c\}^{1/\varphi}$ для $|p-p_c|/p_c \ll 1$. Для изинговских магнетиков с $0 < p < p_c^{(imp)}$ $\varphi = \alpha_{pure} \simeq 0,11$, поэтому примесное поведение с соответствующими универсальными индексами должно наблюдаться в узкой температурной области вблизи $T_c(p)$ с кроссоверными эффектами перехода к индексам для однородных систем. При $p_c^{(imp)} < p < p_c^{(s)}$ кроссоверные эффекты могут наблюдаться вблизи перколяционных пороговых значений. Вдали от них явление кроссовера или не наблюдается или может проявиться в виде перехода между индексами двух типов примесного поведения. В качестве своеобразного экспериментального подтверждения выдвигаемой гипотезы можно рассматривать результаты работы [7], в которой исследование разбавленных магнетиков $Fe_{1-p}Zn_pF_2$ с $p = 0,4$ и 0,5 осуществлялось как раз в области $p_c^{(imp)} < p < p_c^{(s)}$ с $p_c^{(s)} = 1 - p_c^{(imp)} \simeq 0,75$. В работе были получены критические индексы, отличающиеся от индексов однородной системы, но не были обнаружены кроссоверные явления перехода к индексам однородного критического поведения.

1. A.B.Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
2. Д.Е.Хмельницкий, ЖЭТФ **68**, 1960 (1975).
3. G.Grinstein, S-k.Ma, and G.F.Mazenko, Phys. Rev. B **15**, 258 (1977).
4. K.E.Newman, and E.K.Riedel, Phys. Rev. B **25**, 264 (1982).
5. G.Jug, Phys. Rev. B **27**, 609 (1983).
6. В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, ЖЭТФ **101**, 1853 (1992).
7. R.J.Birgeneau et al., Phys. Rev. B **27**, 6747 (1983).
8. J.Marro, A.Labarta, and J.Tejada, Phys. Rev. B **34**, 347 (1986).
9. D.Chowdhury, and D.Stauffer, J. Stat. Phys. **44**, 203 (1986).
10. J.-S.Wang, and D.Chowdhury, J. de Phys. **50**, 2905 (1989).
11. N.Jan, L.L.Moseley, and D.Stauffer, J.Stat. Phys. **33**, 1 (1983).