

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

**В.В. Прудников, В.Н. Бородихин, А.Н. Вакилов,
П.В. Прудников**

For the first time the critical parameters of the effective Hamiltonian for weakly disordered three-dimensional Ising model are determined by Monte Carlo simulation for systems with spin concentrations $p = 0,95; 0,80$. The calculated values of fixed-point coordinates and critical exponents for these spin concentrations are in a good accordance with each other in the range of statistical errors and with field-theoretical results in the six-loop approximation. It can be considered as evidence of critical behaviour universality for weakly disordered systems.

1. Введение

Исследование критического поведения неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Это обусловлено тем, что большинство реальных твердых тел содержит замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на характеристики систем и, в частности, может существенно модифицировать поведение систем при фазовых переходах и индуцировать новые сложные явления в структурно неупорядоченных системах [1–4]. Для понимания сложного критического поведения таких систем, характеризующихся эффектами аномально сильного взаимодействия флуктуаций ряда термодинамических переменных, когда любое возмущение, вносимое дефектами структуры даже при их низкой концентрации, может вызвать сильное изменение состояния системы, требует разработки и применения адекватных аналитических и численных методов описания. Представления теории фазовых переходов и критических явлений, хорошо разработанные для однородных систем [5], могут претерпеть сильные изменения при попытках их распространения на системы со структурным беспорядком, как это имеет место в спиновых стеклах и системах со случайными магнитными полями [4,6]. Как известно, центральной концепцией теории фазовых переходов и критических явлений является принцип универсальности,

© 2003 В.В. Прудников, В.Н. Бородихин, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников

E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

Омский государственный университет

т.е. независимость термодинамических характеристик различных систем при фазовых переходах от различий в значениях мелкомасштабных параметров и разделение всех систем на небольшое число классов универсальности в зависимости от пространственной размерности системы и симметрии его параметра порядка. Однако в случае неупорядоченных систем до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения, как безразмерные амплитуды взаимодействия флуктуаций параметра порядка и критические показатели, универсальными, т.е. не зависящими от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции или существует линия фиксированных точек для значений амплитуд взаимодействия, определяющая непрерывное изменение критических показателей с концентрацией?

Исследования показали [1, 7, 8], что присутствие замороженных точечных дефектов (например, примеси немагнитных атомов в ферро- или антиферромагнитных материалов) изменяет критические свойства систем, теплоемкость которых в однородном состоянии испытывает расходимость в критической точке с показателем $\alpha > 0$. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга.

Теоретико-полевое описание критического поведения слабо неупорядоченной модели Изинга, проведенное непосредственно для трехмерных систем ($d=3$) в высокопетлевых порядках приближения теории (пятипетлевым [9] и шестипетлевым [10]) с применением методов суммирования получаемых асимптотических рядов, позволило с наибольшей доступной к настоящему времени точностью получить значения безразмерных амплитуд взаимодействия флуктуаций параметра порядка g_R и u_R в неподвижной фиксированной точке ренормгрупповых преобразований модели, задающих ее критические свойства. Так, в соответствии с [10] $g^*=36,72(32)$; $u^*=11,89(30)$. Данные значения отражают главную особенность критического поведения, характеризующегося аномально сильным взаимодействием флуктуаций параметра порядка. Поэтому возникает вопрос о сходимости рядов теории возмущения, в также вопрос о том насколько адекватно результаты применения методов суммирования могут соответствовать реальным критическим характеристикам системы. Вычисление критических параметров g^* и u^* эффективного гамильтониана непертурбативным способом представляет большой интерес.

Экспериментальные исследования неупорядоченных систем, таких как кристаллические смеси одноосных Изинго-подобных антиферромагнетиков (FeF_2 , MnF_2) с немагнитными материалами (ZnF_2), показывают существенное отличие значений критических показателей для неупорядоченных систем от соответствующих показателей однородных систем. В частности, для материалов $Fe_xZn_{1-x}F_2$ были измерены значения критических показателей $\nu = 0,70(2)$; $\gamma = 1,34(6)$, а для материалов $Mn_xZn_{1-x}F_2$ $\nu = 0,715(35)$; $\gamma = 1,364(76)$. При этом многочисленные экспериментальные оценки демонстрируют независимость значений критических показателей от концентрации примесей (см. приведенные в [10] таблицы значений измеренных критических показателей, взятые из широкого ряда экспериментальных работ). Поскольку возможности те-

оретического подхода ограничены описанием слабо неупорядоченных систем, проверка данных результатов методом компьютерного моделирования имеет большое значение.

2. Модель

Известно, что исходная неупорядоченная модель в критической области термодинамически эквивалентна $O(N)$ симметричной модели Гинзбурга-Ландау-Вильсона, определяемой эффективным гамильтонианом:

$$H = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi(x))^2 + \frac{m_0^2}{2} \varphi(x)^2 + \frac{V(x)}{2} \varphi^2 + \frac{g_0}{4!} \varphi(x)^4 \right], \quad (1)$$

где $\varphi(x)$ – поле N -компонентного параметра порядка, $V(x)$ – примесный потенциал, $m_0^2 \sim T - T_c(p)$, $T_c(p)$ – критическая температура разбавленного магнетика, зависящая от концентрации спинов p , g_0 – положительная константа.

После применения процедуры репличного усреднения по-гауссовски распределенному потенциалу случайного поля примесей гамильтониан принимает вид:

$$H_{repl} = \int d^d x \left[\frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} (\partial_\mu \varphi_{\alpha,i}(x))^2 + \frac{m_0^2}{2} \sum_{i,\alpha} \varphi_{\alpha,i}(x)^2 + \right. \\ \left. + \frac{g_0}{4!} \sum_{i,\alpha} (\varphi_{\alpha,i}(x)^2)^2 - \frac{u_0}{4!} \left(\sum_{i,\alpha} (\varphi_{\alpha,i}(x))^2 \right)^2 \right], \quad (2)$$

где индекс $i = 1, \dots, N$, а индекс $\alpha = 1, \dots, n$ нумерует реплики (образы) однородной составляющей в гамильтониане неупорядоченной модели (1), а дополнительная вершина u_0 , возникающая в (2), задает эффективное взаимодействие флуктуаций параметра порядка через поле дефектов. В пределе $n \rightarrow 0$ данная модель термодинамически эквивалентна исходной неупорядоченной модели.

После применения процедуры перенормировки – усреднения по мелкомасштабным флуктуациям поля $\varphi(x)$ и последующего масштабного преобразования, сопровождающегося перенормировкой поля параметра порядка в Z раз, устраняющей расходимость параметров модели в критической точке, гамильтониан принимает вид:

$$H_R = \int d^d x \left[\frac{1}{2} \sum_{i,\alpha} (\partial_\mu \varphi_{\alpha,iR}(x))^2 + \frac{m_R^2}{2} \sum_{i,\alpha} \varphi_{\alpha,iR}(x)^2 + \right. \\ \left. + \frac{m_R g_R}{4!} \sum_{i,\alpha} (\varphi_{\alpha,iR}(x)^2)^2 - \frac{m_R u_R}{4!} \left(\sum_{i,\alpha} (\varphi_{\alpha,iR}(x))^2 \right)^2 \right], \quad (3)$$

где индекс R обозначает перенормированные величины, $\varphi = Z_\varphi^{1/2} \varphi_R$, $Z_\varphi = \chi m_R^2$ – перенормировочная константа, χ – восприимчивость, $m_R^2 = 1/\xi^2$ – перенормированная масса модели, ξ – корреляционная длина.

Процедура ренормгрупповых преобразований модели характеризуется наличием предельной неподвижной точки (фиксированной точки) в пространстве безразмерных амплитуд взаимодействия флуктуаций параметра порядка g_R и u_R , которая задает ее критические свойства и позволяет определить критические показатели для основных термодинамических и корреляционных функций системы. Как отмечалось выше, в шестипетлевом приближении [10] для модели Изинга, характеризующейся $N = 1$, $g^* = 36,72(32)$; $u^* = 11,89(30)$.

3. Методика компьютерного моделирования критического поведения неупорядоченной модели Изинга

Значения эффективных амплитуд взаимодействия флуктуаций могут быть получены методами компьютерного моделирования путем вычисления различных корреляционных функций или моментов функций распределения для параметра порядка. Монте-Карло-результаты в критической области для нетривиальной фиксированной точки однородной модели Изинга [11, 12] находятся в хорошем соответствии с результатами теоретико-полевого подхода.

В настоящей работе впервые методом Монте-Карло определены координаты фиксированной точки эффективного гамильтониана (3) для концентраций спинов $p=0,95; 0,80$.

Рассматривается трехмерная модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с размерами L и наложенными периодическими граничными условиями. С узлами решетки связаны спины σ_i , принимающие значения ± 1 , и немагнитные атомы примеси (пустые узлы с $\sigma_i \equiv 0$). Данная система описывается гамильтонианом:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} p_i p_j \sigma_i \sigma_j, \quad (4)$$

где J_{ij} – константа обменного ферромагнитного взаимодействия, p_i – случайная переменная, описываемая функцией распределения

$$P(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p)\delta(p_i) \quad (5)$$

с $p = 1 - c$, где c – концентрация примеси.

Примесь равномерно распределяется по всей системе, и ее положение фиксируется для отдельной примесной конфигурации в процессе моделирования системы. Концентрация спинов определяется суммированием абсолютных значений спинов по всем узлам решетки

$$p = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} p_i |\sigma_i|.$$

При создании спиновой конфигурации со случайно распределенными примесями в решетке возникают геометрические кластеры узлов со спинами. При

концентрации спинов p больших порога спиновой перколяции p_c в системе практически всегда существует спиновый кластер, характеризующийся общей связностью (протеканием) с одной грани решетки на другую грань, и какое-то количество изолированных кластеров, содержащих относительно небольшое число спинов. В пределе бесконечно большого размера решетки вклад в магнитные характеристики системы будут давать только скоррелированные спины бесконечного перколяционного кластера, поэтому при вычислении критических характеристик имеет смысл не учитывать вклад от узлов, не связанных с перколяционным кластером. Такая процедура позволяет уменьшить «шум» от спинов кластеров конечного размера.

Для распределения спинов с заданной концентрацией p по узлам решетки использовался алгоритм выращивания перколяционного кластера Хаммерсли-Лиса-Александровица [13]. Практические детали реализации данного алгоритма следующие. В центре кубической решетки размещается затравочный спин. Шесть соседних узлов образуют «периметр» затравочного спина. Случайным образом выбирается узел из «периметра». Затем с вероятностью p этот узел занимает спином, а его соседи добавляются в «периметр». В противном случае узел остается свободным (примесным). Чтобы узлы решетки оставались свободными с вероятностью $1 - p$, данный узел больше не проверяется. Если узел уже занят спином, то определяется, нет ли новых непроверенных узлов «периметра». Процедура повторяется до тех пор, пока не будут просмотрены все узлы периметра. Среди выращиваемых в соответствии с данным алгоритмом спиновых конфигураций выбирались для последующего моделирования только те из них, у которых концентрация примесей s отличалась от заданной $s = 1 - p$ не более чем на десять процентов.

В основе компьютерного моделирования статистических процессов лежит метод Монте-Карло, суть которого заключается в использовании случайных чисел для машинной имитации вероятностных распределений. В данной работе для получения последовательных спиновых конфигураций был применен одно-кластерный алгоритм Вольфа [14], который по сравнению с традиционным для метода Монте-Карло алгоритмом Метрополиса позволяет получать значительно менее скоррелированную последовательность спиновых конфигураций, что особенно важно для моделирования критического поведения систем большого размера. Известно, что время корреляции между двумя состояниями системы с линейным размером L вблизи критической температуры ведет себя как $t_{cor} \simeq L^z$. При этом для алгоритма Метрополиса показатель $z_M \simeq 2$, а для алгоритма Вольфа $z_W \simeq 0,5$.

Примененный в работе вариант алгоритма Вольфа состоял в следующем. В системе случайным образом выбирается спин и переворачивается. Затем рассматриваются ближайшие соседи спина, и если они сонаправлены с этим «центральным» спином (неперевернутым), то с вероятностью $1 - \exp(-2\beta)$, где $\beta = 1/T$, они также переворачиваются, а их координаты заносятся в стек. После того, как проведена проверка всех соседних спинов, спин, координаты которого были занесены в стек последними, выбирается «центральным», и вся процедура затем повторяется. Процесс повторяется до тех пор, пока стек не окажется

пустым, что соответствует полному перевороту кластера Вольфа. По данному алгоритму реализуется марковский процесс и с соответствующей вероятностью генерируются конфигурации спинов.

Для уменьшения корреляций спиновых конфигураций вычисление намагниченности и других термодинамических величин осуществлялось через три переворота кластера Вольфа, что условно можно назвать одним Монте-Карло-шагом.

В самом начале процесса все спины полагались сонаправленными (что соответствует состоянию системы при $T = 0$). Процедуре установления термодинамического равновесия в системе, соответствующего температуре T , отводилось 10^4 шагов Монте-Карло.

Поскольку моделируемая система являлась неупорядоченной, кроме усреднения по спиновым конфигурациям проводилось усреднение по различным примесным конфигурациям. В данной работе использовалось 500 примесных конфигураций. Для проведения статистического усреднения каждой примесной конфигурации сопоставлялось 10^5 спиновых конфигураций, или Монте-Карло-шагов.

В процессе моделирования при усреднении по всей совокупности спиновых и примесных конфигураций осуществлялся расчет корреляционной длины ξ и восприимчивости χ по формулам [15], обобщенным на случай неупорядоченных систем:

$$\xi = \frac{1}{2 \sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1}, \quad \chi = \frac{1}{L^3} \overline{\langle S^2 \rangle}, \quad (6)$$

где $S = \sum_i p_i \sigma_i$, $F = \overline{\langle \Phi \rangle} / L^3$,

$$\Phi = \frac{1}{3} (|\sum_i p_i \sigma_i \exp \frac{2\pi i x_{1,i}}{L}|^2 + |\sum_i p_i \sigma_i \exp \frac{2\pi i x_{2,i}}{L}|^2 + |\sum_i p_i \sigma_i \exp \frac{2\pi i x_{3,i}}{L}|^2), \quad (7)$$

$(x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i})$ – координаты i -о узла решетки, $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта сверху – усреднение по примесным конфигурациям.

Эффективные амплитуды взаимодействия флуктуаций параметра порядка u_R и g_R в гамильтониане (3) вычислялись в результате усреднения по всей совокупности примесных конфигураций следующих выражений для кумулянтов и корреляционных функций:

$$g_R = 3 \left(\frac{L}{\xi}\right)^3 \left(1 - \frac{\overline{\langle S^4 \rangle}}{3 \overline{\langle S^2 \rangle}^2}\right), \quad (8)$$

$$u_R = \frac{3\chi^2}{\xi^3} \frac{\overline{\langle S_\alpha^2 S_\beta^2 \rangle} - \overline{\langle S^2 \rangle}^2}{\overline{\langle S^2 \rangle}^2}. \quad (9)$$

Индексы α и β в (9) характеризуют спиновые конфигурации для различных реплик неупорядоченной системы размера L , моделируемых одновременно при одной и той же температуре и отличающихся различными начальными конфигурациями.

4. Результаты компьютерного моделирования

Для системы со спиновой концентрацией $p = 0,95$ измерения проводились при температурах $T=4,275; 4,285; 4,295; 4,315; 4,335$, а для системы с $p = 0,80$ при температурах $T=3,51; 3,52; 3,53; 3,55; 3,57$, т.е. в интервале изменения приведенной температуры $\tau = |T - T_c(p)|/T_c(p) = 10^{-3} - 10^{-2}$, в которой наиболее ярко проявляются флуктуационные эффекты влияния дефектов структуры. При этом использовались значения критической температуры фазового перехода $T_c = 4,2571$ для $p = 0,95$ и $T_c = 3,4959$ для $p = 0,80$, определенные в работе [16]. В табл. 1,2 приведены найденные при вышеперечисленных температурах значения корреляционной длины ξ , восприимчивости χ , вершин g и u для решеток с размерами $L=20 - 130$ для системы с $p = 0,95$, и размерами $L=20 - 170$ для $p = 0,80$. Для каждой температуры исследование ограничивалось тем максимальным размером решетки L_{max} , при котором все вычисляемые физические величины, определяющие критическое поведение системы, выходят на асимптотику.

Из приведенных в табл.1,2 данных видно, что чем ближе температура системы к критической $T_c(p)$, тем при больших размерах решетки L измеряемые величины достигают своего асимптотического значения. Так, для систем с $p = 0,95$ при температуре $T = 4,275$, ближайшей к критической температуре $T_c = 4,2571$, $L_{max} = 130$, тогда как для $T = 4,335$ $L_{max} = 60$. Это связано с ростом флуктуаций параметра порядка и увеличением флуктуационного вклада в измеряемые величины по мере приближения к критической температуре. Более того, с уменьшением концентрации спинов p процедура выделения асимптотических значений измеряемых величин при одинаковых значениях приведенных температур τ требует рассмотрения решеток с большими размерами L_{max} . Так, для системы с $p = 0,80$ достижение асимптотического значения для вершины u при температуре $T = 3,51$ потребовало использования решетки с $L_{max} = 170$.

Огромный объем вычислительной работы, потребовавшийся для получения приведенных в статье результатов, был выполнен на созданном в лаборатории Прикладной теоретической физики и параллельных вычислений Омского государственного университета (руководитель Прудников В.В.) высокопроизводительном вычислительном кластере. Кластер собран на базе десяти двухпроцессорных машин Pentium III/1000MHz. Реальная производительность кластера, достигнутая на тесте SCALAPAC при решении системы из 25 тысяч линейных алгебраических уравнений, равна 8,4 GFLOPS.

Известно, что в конечной системе не может проявиться настоящий фазовый переход. Тем не менее можно ожидать, что если $\xi(T)$ меньше линейного размера L системы, то конечная система будет правильно передавать термодинамические свойства бесконечной системы при применении методики конечно-мерного скейлинга [12,17]. Методика конечно-мерного скейлинга позволяет осуществить выделение термодинамических значений физических величин на основе их значений, полученных для решетки размера L , при температурах, принадлежащих критической области $\tau \ll 1$.

Основная идея теории конечно-мерного скейлинга состоит в том, что зна-

Таблица 1. Численная зависимость физических величин для системы с $p=0,95$ от размеров решетки L для различных температур в критической области.

T	L	ξ	x	χ	g	u
4,335	60	$6,70 \pm 0,04$	0,112	205 ± 3	$30,61 \pm 0,84$	$9,32 \pm 0,33$
	50	$6,67 \pm 0,04$	0,133	204 ± 3	$30,53 \pm 0,84$	$9,56 \pm 0,34$
	40	$6,50 \pm 0,03$	0,162	203 ± 2	$30,31 \pm 0,83$	$10,32 \pm 0,36$
	30	$6,28 \pm 0,03$	0,209	192 ± 2	$28,58 \pm 0,72$	$12,34 \pm 0,39$
	20	$6,04 \pm 0,02$	0,302	187 ± 2	$26,23 \pm 0,60$	$15,82 \pm 0,43$
4,315	60	$8,13 \pm 0,05$	0,136	360 ± 4	$33,02 \pm 0,95$	$8,36 \pm 0,26$
	56	$8,12 \pm 0,04$	0,145	356 ± 4	$32,85 \pm 0,95$	$8,62 \pm 0,28$
	50	$8,08 \pm 0,04$	0,162	350 ± 4	$32,48 \pm 0,93$	$9,34 \pm 0,33$
	40	$7,75 \pm 0,03$	0,194	330 ± 3	$30,48 \pm 0,82$	$11,26 \pm 0,37$
	30	$7,42 \pm 0,03$	0,247	320 ± 3	$27,00 \pm 0,64$	$15,46 \pm 0,42$
4,295	80	$12,02 \pm 0,06$	0,150	538 ± 5	$31,86 \pm 0,91$	$8,35 \pm 0,39$
	75	$11,98 \pm 0,05$	0,160	538 ± 5	$31,73 \pm 0,90$	$8,74 \pm 0,40$
	70	$11,92 \pm 0,05$	0,170	533 ± 5	$31,23 \pm 0,87$	$9,20 \pm 0,42$
	60	$11,68 \pm 0,05$	0,195	508 ± 5	$30,44 \pm 0,82$	$10,54 \pm 0,44$
	50	$11,50 \pm 0,05$	0,230	503 ± 5	$29,29 \pm 0,77$	$12,55 \pm 0,46$
	40	$11,18 \pm 0,04$	0,279	484 ± 4	$27,54 \pm 0,65$	$16,61 \pm 0,50$
	30	$10,41 \pm 0,03$	0,347	429 ± 4	$23,62 \pm 0,50$	$26,04 \pm 0,62$
4,285	100	$14,05 \pm 0,06$	0,141	854 ± 6	$32,37 \pm 0,94$	$9,22 \pm 0,40$
	90	$14,03 \pm 0,06$	0,156	851 ± 6	$32,23 \pm 0,93$	$9,62 \pm 0,42$
	80	$13,95 \pm 0,05$	0,174	847 ± 6	$31,85 \pm 0,91$	$10,23 \pm 0,48$
	70	$13,81 \pm 0,05$	0,197	839 ± 5	$31,20 \pm 0,87$	$11,32 \pm 0,52$
	60	$13,77 \pm 0,05$	0,229	822 ± 5	$30,44 \pm 0,82$	$13,07 \pm 0,55$
	50	$13,52 \pm 0,04$	0,270	790 ± 5	$28,11 \pm 0,69$	$16,56 \pm 0,58$
	40	$13,09 \pm 0,04$	0,327	731 ± 4	$25,11 \pm 0,60$	$24,32 \pm 0,62$
	30	$12,46 \pm 0,04$	0,415	640 ± 3	$20,99 \pm 0,54$	$33,44 \pm 0,95$
4,275	130	$19,35 \pm 0,08$	0,149	1623 ± 9	$33,96 \pm 1,02$	$8,97 \pm 0,40$
	120	$19,30 \pm 0,08$	0,161	1622 ± 9	$33,84 \pm 1,02$	$9,05 \pm 0,40$
	110	$19,21 \pm 0,08$	0,175	1621 ± 9	$33,48 \pm 0,96$	$9,15 \pm 0,42$
	100	$19,03 \pm 0,07$	0,190	1619 ± 9	$32,80 \pm 0,93$	$9,57 \pm 0,44$
	90	$18,80 \pm 0,07$	0,209	1612 ± 9	$31,50 \pm 0,89$	$10,32 \pm 0,50$
	80	$18,60 \pm 0,07$	0,233	1594 ± 8	$30,00 \pm 0,80$	$11,83 \pm 0,53$
	70	$18,05 \pm 0,06$	0,258	1561 ± 8	$28,31 \pm 0,75$	$14,18 \pm 0,56$
	60	$17,49 \pm 0,06$	0,292	1488 ± 7	$26,31 \pm 0,69$	$20,31 \pm 0,62$
	50	$16,54 \pm 0,05$	0,331	1350 ± 6	$23,78 \pm 0,61$	$27,28 \pm 0,78$
	40	$14,85 \pm 0,05$	0,371	1133 ± 5	$20,42 \pm 0,52$	$35,08 \pm 1,05$

Таблица 2. Численная зависимость физических величин для системы с $p=0,80$ от размеров решетки L для различных температур.

T	L	ξ	x	χ	g	u
3,57	50	$7,32 \pm 0,04$	0,146	253 ± 4	$28,22 \pm 0,76$	$11,62 \pm 0,38$
	45	$7,31 \pm 0,04$	0,162	251 ± 3	$28,20 \pm 0,75$	$11,98 \pm 0,40$
	40	$7,28 \pm 0,03$	0,182	249 ± 3	$28,14 \pm 0,73$	$15,12 \pm 0,43$
	30	$6,76 \pm 0,03$	0,225	228 ± 3	$27,98 \pm 0,70$	$27,54 \pm 0,71$
	20	$5,71 \pm 0,02$	0,286	188 ± 2	$27,65 \pm 0,65$	$59,80 \pm 1,18$
3,55	60	$8,91 \pm 0,06$	0,149	373 ± 5	$29,27 \pm 0,81$	$11,20 \pm 0,38$
	55	$8,88 \pm 0,05$	0,161	371 ± 5	$29,24 \pm 0,81$	$11,70 \pm 0,38$
	50	$8,86 \pm 0,05$	0,177	370 ± 5	$29,13 \pm 0,80$	$14,40 \pm 0,54$
	40	$8,41 \pm 0,05$	0,210	350 ± 4	$28,75 \pm 0,76$	$25,18 \pm 0,63$
	30	$7,86 \pm 0,04$	0,262	333 ± 3	$27,95 \pm 0,70$	$41,96 \pm 0,94$
3,53	90	$12,27 \pm 0,08$	0,136	694 ± 8	$29,78 \pm 0,82$	$11,20 \pm 0,38$
	80	$12,19 \pm 0,07$	0,152	686 ± 7	$29,65 \pm 0,82$	$11,41 \pm 0,40$
	70	$12,05 \pm 0,07$	0,172	677 ± 7	$29,29 \pm 0,80$	$12,38 \pm 0,53$
	60	$11,82 \pm 0,06$	0,197	667 ± 6	$28,75 \pm 0,77$	$18,00 \pm 0,60$
	50	$11,38 \pm 0,05$	0,228	655 ± 5	$28,10 \pm 0,73$	$30,00 \pm 0,78$
	40	$10,68 \pm 0,04$	0,267	622 ± 5	$27,06 \pm 0,62$	$51,50 \pm 0,98$
	30	$9,30 \pm 0,04$	0,310	529 ± 4	$25,48 \pm 0,50$	$82,00 \pm 1,14$
3,52	110	$15,88 \pm 0,09$	0,144	1094 ± 9	$29,92 \pm 0,85$	$11,32 \pm 0,50$
	100	$15,81 \pm 0,09$	0,158	1092 ± 9	$29,84 \pm 0,85$	$11,80 \pm 0,53$
	90	$15,56 \pm 0,09$	0,173	1087 ± 9	$29,72 \pm 0,84$	$12,93 \pm 0,54$
	80	$15,42 \pm 0,08$	0,193	1078 ± 9	$29,51 \pm 0,82$	$15,82 \pm 0,57$
	70	$15,15 \pm 0,08$	0,216	1063 ± 8	$29,20 \pm 0,80$	$25,02 \pm 0,65$
	60	$14,42 \pm 0,08$	0,240	1020 ± 8	$28,60 \pm 0,76$	$36,44 \pm 0,80$
	50	$13,51 \pm 0,07$	0,270	944 ± 7	$27,40 \pm 0,64$	$53,02 \pm 0,99$
	40	$12,19 \pm 0,07$	0,305	824 ± 6	$24,86 \pm 0,49$	$81,38 \pm 1,12$
3,51	170	$24,31 \pm 0,18$	0,143	2408 ± 17	$31,73 \pm 0,90$	$11,05 \pm 0,52$
	160	$24,18 \pm 0,18$	0,151	2403 ± 17	$31,60 \pm 0,89$	$11,62 \pm 0,54$
	150	$24,01 \pm 0,17$	0,160	2392 ± 16	$31,42 \pm 0,89$	$12,43 \pm 0,55$
	140	$23,89 \pm 0,17$	0,171	2384 ± 16	$31,15 \pm 0,88$	$13,92 \pm 0,56$
	130	$23,67 \pm 0,16$	0,182	2373 ± 16	$30,85 \pm 0,87$	$16,03 \pm 0,58$
	120	$23,38 \pm 0,16$	0,195	2359 ± 16	$30,41 \pm 0,86$	$18,42 \pm 0,60$
	100	$22,27 \pm 0,15$	0,223	2289 ± 15	$29,24 \pm 0,80$	$27,56 \pm 0,76$
	90	$21,39 \pm 0,14$	0,238	2183 ± 14	$28,51 \pm 0,76$	$33,45 \pm 0,80$
	70	$19,26 \pm 0,12$	0,275	1894 ± 11	$26,62 \pm 0,60$	$52,36 \pm 0,98$
	60	$17,32 \pm 0,10$	0,289	1641 ± 9	$25,38 \pm 0,54$	$62,54 \pm 1,04$
	50	$15,30 \pm 0,08$	0,306	1359 ± 6	$22,97 \pm 0,47$	$77,30 \pm 1,10$

чения A_L некоторой физической величины A на конечной решетке с линейным размером L в критической области могут быть представлены в виде однородной функции от переменной $s = L/\xi(\tau)$:

$$A_L(\tau) = L^{\delta/\nu} f_A(s(L, \tau)), \quad (10)$$

где δ – критический индекс для термодинамической величины $A \sim \tau^{-\delta}$. С учетом температурной зависимости корреляционной длины в критической области $\xi \sim \tau^{-\nu}$ выражение для скейлинговой переменной $s(L, \tau)$ можно записать в виде

$$s(L, \tau) = (A(\tau)/L^{\delta/\nu})^{-\nu/\delta}. \quad (11)$$

Тогда уравнение (10) можно переписать как

$$A_L(\tau) = A(\tau)F_A(s(L, \tau)), \quad (12)$$

задавая связь между скейлинговыми функциями f_A и F_A в виде следующего соотношения

$$F_A(s) = s^{\delta/\nu} f_A(s). \quad (13)$$

Когда в качестве физической величины A выступает корреляционная длина ξ , уравнение (12) задает $\xi_L(\tau)/L$ как функцию только от $\xi(\tau)/L$, что приводит к соотношению

$$A_L(\tau) = A(\tau)Q_A(x(L, \tau)), \quad (14)$$

где $x(L, \tau) = \xi_L(\tau)/L$, а функция $Q_A(x)$ задается выражением

$$Q_A(x) = F_A(f_\xi^{-1}(x)). \quad (15)$$

Тогда алгоритм процедуры конечно-мерного скейлинга выделения термодинамических значений физических величин по измеряемым величинам на конечной решетке может быть представлен в виде последовательности следующих операций. Для заданной температуры T измеряются значения некоторой физической величины $A_L(\tau)$ и $x = \xi_L(\tau)/L$ при увеличивающемся L . Затем определяется значение L_{max} с универсальным отношением $x_c = \xi(L_{max}, \tau)/L_{max}$ таким, что при $x \leq x_c$ величина $A_L(\tau)$ становится независимой от размеров системы в пределах статистических погрешностей результатов и приобретает термодинамический характер. Полученные значения $A_L(\tau)$ для каждого T аппроксимируются с помощью специально подобранной функции $Q_{A(x)}$ таким образом, чтобы значения величины A не зависели от размеров системы, т.е. $A(\tau) = A_L(\tau)/Q_A(x(L, \tau))$. В соответствии с рекомендациями работы [12] функция $Q_A(x)$ была выбрана в виде $Q(x) = 1 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4$ с подбираемыми по методу наименьших квадратов коэффициентами c_i . Функция $Q_A(x)$ характеризуется универсальностью для значений температур, принадлежащих критической области, и значений $x \leq x_c$. Это позволяет использовать ее для нахождения термодинамических значений величин при температурах T столь близких к T_c , при которых L_{max} может быть и недостижима, но известны величины $A_L(\tau)$ и $x = \xi_L(\tau)/L$ при $L < L_{max}$. Важной особенностью функции $Q_A(x)$

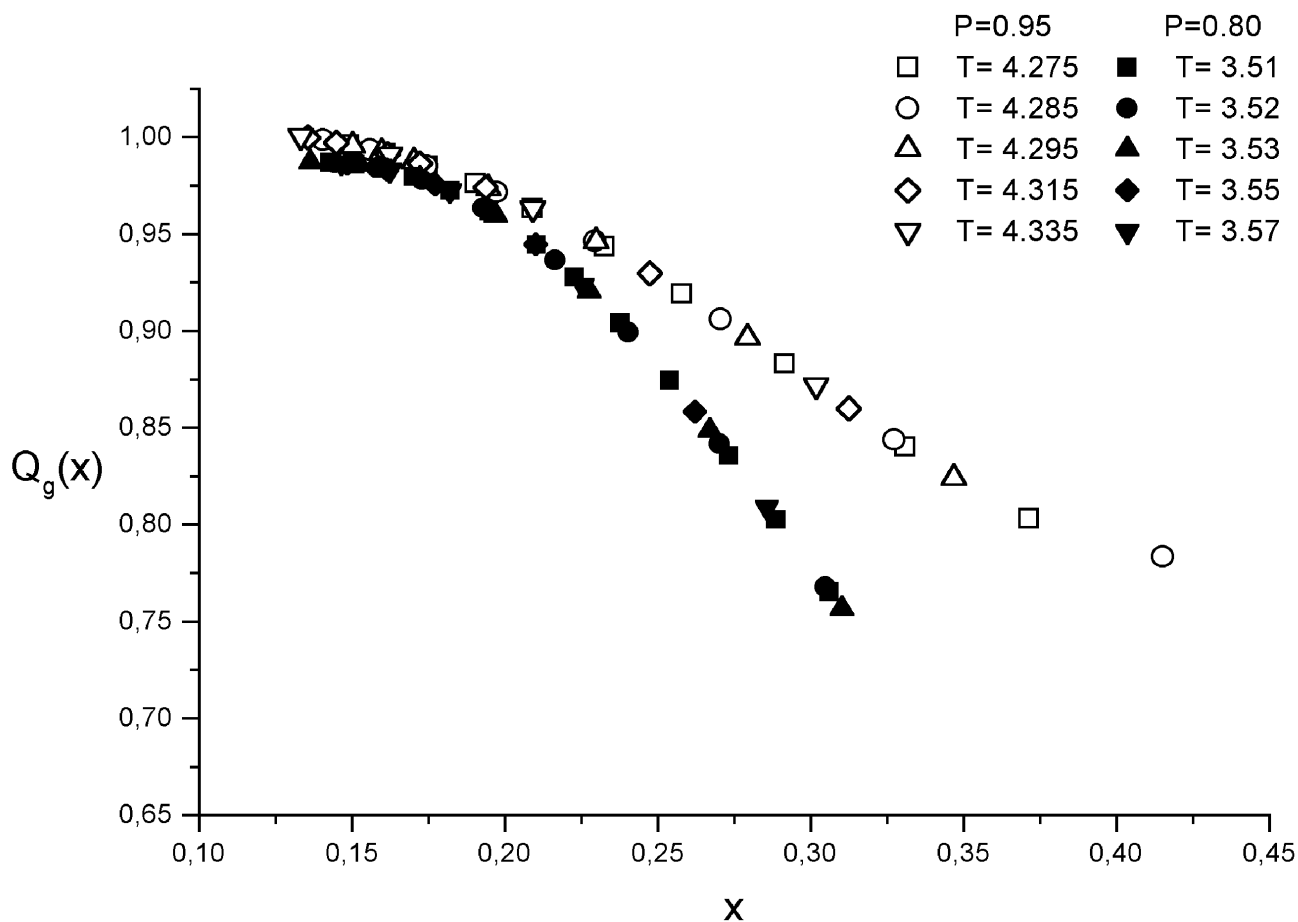


Рис. 1. Графическое представление скейлинговой функции $Q_g(x)$ для различных температур и спиновых концентраций $p = 0,95$ и $p = 0,80$.

является ее независимость в скейлинговой области от каких-либо критических индексов [12, 17]. Графики функций $Q_g(x)$ (рис.1) и $Q_u(x)$ (рис.2), построенные для различных температур и спиновых концентраций $p = 0,95; 0,80$, демонстрируют эту универсальность для $x \leq x_c \simeq 0,15$. Из рисунков видно, что данные скейлинговые функции не обладают температурной зависимостью, а зависимость от концентрации спинов p исчезает для $x \simeq 0,15$.

В табл. 3 приведены результирующие зависимости значений корреляционной длины ξ , восприимчивости χ и вершин g_R и u_R от температуры, найденные с помощью процедуры конечно-мерного скейлинга для систем с $p = 0,95; 0,80$.

Из выявленной температурной зависимости перенормированных вершин g_R и u_R могут быть выделены их критические значения g^*, u^* на основе известных скейлинговых зависимостей данных вершин

$$g_R(\tau) = g^*(1 + a\tau^\theta), \tag{16}$$

$$u_R(\tau) = u^*(1 + b\tau^\theta) \tag{17}$$

с показателем $\theta = \nu\omega$, задаваемым ν – критическим индексом для корреляционной длины и ω – критическим индексом, характеризующим поправки к

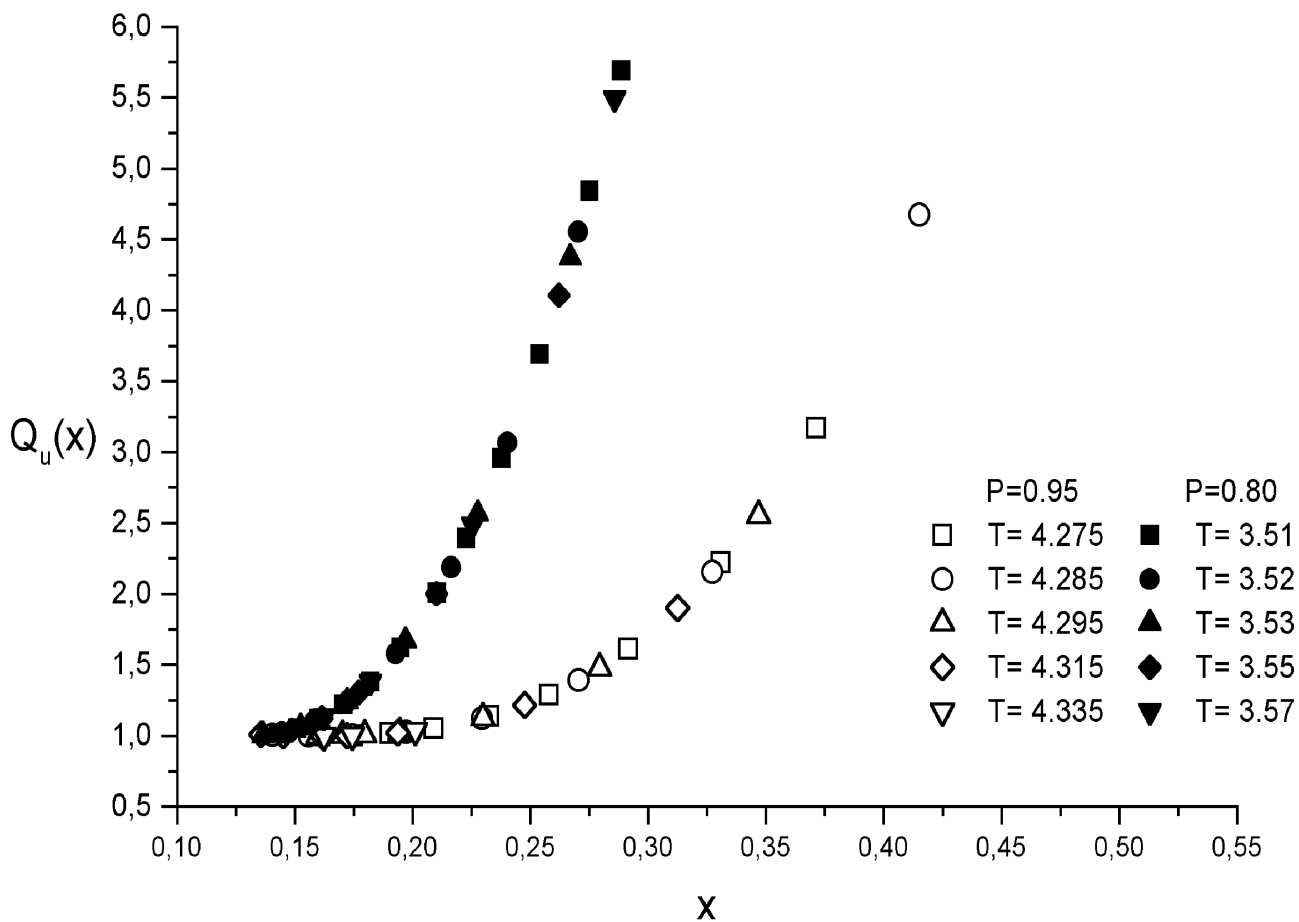


Рис. 2. Графическое представление скейлинговой функции $Q_u(x)$ для различных температур и спиновых концентраций $p = 0,95$ и $p = 0,80$.

Таблица 3. Температурная зависимость поведения физических величин в критической области, выделенная на основе процедуры конечно-мерного скейлинга, для систем с концентрацией спинов 0,95 и 0,80.

p	T	ξ	χ	g	u
0,95	4,275	$20,93 \pm 0,11$	1622 ± 12	$31,46 \pm 1,12$	$10,36 \pm 0,68$
	4,285	$15,73 \pm 0,09$	906 ± 8	$31,13 \pm 1,03$	$10,24 \pm 0,60$
	4,295	$12,68 \pm 0,08$	526 ± 6	$30,87 \pm 0,99$	$10,13 \pm 0,52$
	4,315	$8,33 \pm 0,06$	343 ± 5	$30,49 \pm 1,04$	$9,98 \pm 0,40$
	4,335	$6,86 \pm 0,04$	203 ± 4	$30,27 \pm 0,92$	$9,92 \pm 0,40$
0,80	3,51	$22,91 \pm 0,18$	2217 ± 17	$31,62 \pm 1,01$	$11,22 \pm 0,73$
	3,52	$15,87 \pm 0,10$	1088 ± 10	$31,19 \pm 0,88$	$11,13 \pm 0,71$
	3,53	$12,55 \pm 0,08$	679 ± 8	$30,89 \pm 0,85$	$11,07 \pm 0,63$
	3,55	$9,03 \pm 0,06$	363 ± 6	$30,45 \pm 0,83$	$10,99 \pm 0,51$
	3,57	$7,29 \pm 0,04$	238 ± 4	$30,14 \pm 0,76$	$10,94 \pm 0,60$

скейлингу. Показатель θ характеризует также поправки к асимптотическому температурному поведению корреляционной длины и восприимчивости

$$\xi(\tau) \sim \tau^{-\nu}(1 + c\tau^\theta), \quad (18)$$

$$\chi(\tau) \sim \tau^{-\gamma}(1 + d\tau^\theta). \quad (19)$$

В соответствии с результатами работы [10] при $\omega = 0,25(10)$ и $\nu = 0,6837(53)$ показатель $\theta = 0,17(10)$. В работе [18] методами компьютерного моделирования критического поведения неупорядоченной модели Изинга были получены значения показателей $\nu = 0,6837(29)$; $\omega = 0,37(6)$, которым соответствует $\theta = 0,25(6)$. С целью определения значений критических амплитуд взаимодействия флуктуаций параметра порядка в фиксированной точке g^* , u^* мы по соотношениям (16)-(17) провели аппроксимацию полученных температурных зависимостей для g_R и u_R (табл.3) для значений показателя θ в интервале $0,15-0,25$. Результаты аппроксимаций представлены в табл.4 для спиновых концентраций $p = 0,95; 0,80$. Из приведенных в таблице значений видно, что величина изменений g^* , u^* , обусловленная как изменением показателя θ , так и концентрацией спинов p , находится в пределах статистических погрешностей определения g^* , u^* . Сопоставление полученных значений g^* , u^* с теоретико-полевыми $g^* = 36,72(32)$; $u^* = 11,89(30)$, вычисленными в шестипетлевом приближении [10], указывает на их достаточно хорошее согласие в пределах погрешности результатов. При этом вычисленные нами средние значения g^* и u^* для $p = 0,95$ и $p = 0,80$ лучше согласуются с теоретико-полевыми значениями при θ близких к $\theta = 0,17$, чем к $\theta = 0,25$.

Следует отметить, что вычисляемые в рамках теоретико-полевого приближения значения перенормированных вершин в фиксированной точке существенно зависят от порядка приближения теории и методов суммирования, применяемых для анализа рядов теории возмущения [9, 10, 19–22]. Так, в [9] были получены значения $g^* = 37,88(30)$, $u^* = 13,40(20)$ в пятипетлевом приближении с использованием метода суммирования Паде-Бореля-Леруа. В работе [10] анализировались результаты четырехпетлевого приближения и были представлены значения $g^* = 37,60$, $u^* = 12,57$, полученные в [19] с использованием метода суммирования Чисхолма-Бореля, $g^* = 37,36 \pm 1,20$; $u^* = 10,97 \pm 1,30$ и $g^* = 36,64(90)$; $u^* = 11,78(90)$, полученные в [20] с использованием различных наборов аппроксимантов Паде, $g^* = 36,49$; $u^* = 11,06$, полученные в [21] с использованием ϵ -алгоритма Вина.

Из полученных данных по температурной зависимости корреляционной длины $\xi(\tau)$ и восприимчивости $\chi(\tau)$ (табл.3) нами в соответствии с выражениями (18)-(19) были выделены значения критических индексов ν и γ для значений критического индекса поправки к скейлингу θ , изменяющихся в интервале $0,15-0,25$ (табл.4).

Из представленных в таблице значений ν и γ видно, что они слабо зависят от изменения θ в данном интервале, а наблюдаемые изменения средних значений ν и γ от θ попадают в интервал погрешностей определения этих критических индексов. При сопоставлении значений критических индексов ν и γ , полученных

Таблица 4. Зависимость координат фиксированной точки (g^*, u^*) и критических индексов ν и γ от значений критического индекса θ для систем с концентраций спинов 0,95 и 0,80.

p	θ	g^*	u^*	ν	γ
0,95	0,15	$36,35 \pm 1,16$	$12,21 \pm 0,66$	$0,6797 \pm 0,0028$	$1,340 \pm 0,007$
	0,16	$36,01 \pm 1,16$	$12,08 \pm 0,66$	$0,6801 \pm 0,0028$	$1,340 \pm 0,007$
	0,17	$35,71 \pm 1,16$	$11,96 \pm 0,66$	$0,6804 \pm 0,0028$	$1,340 \pm 0,007$
	0,18	$35,44 \pm 1,16$	$11,86 \pm 0,66$	$0,6808 \pm 0,0029$	$1,340 \pm 0,007$
	0,19	$35,20 \pm 1,16$	$11,77 \pm 0,66$	$0,6811 \pm 0,0029$	$1,340 \pm 0,007$
	0,20	$34,98 \pm 1,16$	$11,69 \pm 0,66$	$0,6815 \pm 0,0029$	$1,341 \pm 0,007$
	0,21	$34,79 \pm 1,16$	$11,61 \pm 0,67$	$0,6818 \pm 0,0030$	$1,341 \pm 0,007$
	0,22	$34,61 \pm 1,17$	$11,55 \pm 0,67$	$0,6822 \pm 0,0030$	$1,341 \pm 0,007$
	0,23	$34,45 \pm 1,17$	$11,49 \pm 0,67$	$0,6825 \pm 0,0031$	$1,341 \pm 0,007$
	0,24	$34,30 \pm 1,17$	$11,43 \pm 0,67$	$0,6829 \pm 0,0031$	$1,341 \pm 0,007$
	0,25	$34,16 \pm 1,17$	$11,38 \pm 0,67$	$0,6832 \pm 0,0031$	$1,341 \pm 0,007$
0,80	0,15	$36,87 \pm 0,98$	$12,21 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0027$	$1,345 \pm 0,007$
	0,16	$36,50 \pm 0,98$	$12,14 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0027$	$1,345 \pm 0,007$
	0,17	$36,17 \pm 0,98$	$12,08 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0027$	$1,345 \pm 0,007$
	0,18	$35,88 \pm 0,98$	$12,02 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0028$	$1,345 \pm 0,007$
	0,19	$35,62 \pm 0,98$	$11,97 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0028$	$1,345 \pm 0,007$
	0,20	$35,38 \pm 0,98$	$11,93 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0028$	$1,345 \pm 0,007$
	0,21	$35,17 \pm 0,98$	$11,89 \pm 0,70$	$0,6832 \pm 0,0028$	$1,345 \pm 0,007$
	0,22	$34,98 \pm 0,98$	$11,85 \pm 0,70$	$0,6833 \pm 0,0028$	$1,345 \pm 0,007$
	0,23	$34,80 \pm 0,98$	$11,82 \pm 0,70$	$0,6833 \pm 0,0029$	$1,345 \pm 0,007$
	0,24	$34,64 \pm 0,99$	$11,79 \pm 0,71$	$0,6833 \pm 0,0029$	$1,345 \pm 0,007$
	0,25	$34,49 \pm 0,99$	$11,76 \pm 0,71$	$0,6833 \pm 0,0029$	$1,345 \pm 0,007$

для спиновых концентраций $p = 0,95$ и $p = 0,80$, видно, что хотя для каждого значения θ наблюдается некоторое увеличение средних значений индексов с ростом концентрации точечных дефектов, однако эти изменения также находятся в пределах статистических погрешностей определения данных критических индексов. Сопоставление полученных результатов с теоретико-полевыми значениями критических индексов $\gamma = 1,342(10)$ и $\nu = 0,6837(53)$ [10] показывает, что они находятся в хорошем согласии друг с другом.

Подводя итоги, можно сделать следующие выводы: полученные в результате компьютерного моделирования критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга значения критических амплитуд взаимодействия флуктуаций параметра порядка в фиксированной точке g^* , u^* и критических индексов корреляционной длины ν и магнитной восприимчивости γ достаточно хорошо согласующиеся друг с другом в пределах погрешности численного эксперимента для различных спиновых концентраций $p = 0,95$ и $p = 0,80$ и с теоретико-полевыми значениями, вычисленными в рекордном на настоящее время шестипетлевом приближении, убедительно доказывают универсальность критического поведения слабо неупорядоченных систем. Отметим также, что полученные результаты для g^* и u^* указывают на устойчивость критического поведения слабо неупорядоченных изингоподобных трехмерных систем относительно эффектов нарушения репличной симметрии, которые согласно работам [23] должны были бы вызвать в данных системах флуктуационное нарушение устойчивости критического состояния. Данные выводы согласуются с представленными в наших работах [24] результатами теоретико-полевого описания критического поведения слабо неупорядоченных систем с введенным потенциалом взаимодействия, задающим нарушение репличной симметрии.

В заключение отметим, что мы предполагаем распространить развитую в настоящей работе методику на случай неупорядоченных систем с большими значениями концентрации примесей, осуществить выделение для них координат фиксированной точки и определение значений критических индексов. Этот цикл исследований позволит ответить на фундаментальный вопрос о возможной универсальности критического поведения неупорядоченных систем в широкой области концентраций примеси или о ее нарушении в условиях сильной неупорядоченности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Harris A.B. *Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models* // J. Phys. C. 1974. V.7, N6. P.1671-1692.
2. Хмельницкий Д.Е. *Фазовый переход второго рода в неоднородных телах*// ЖЭТФ 1975. Т.68. P.1960.
3. Stinchcombe R.B. in *Phase transitions and critical phenomena*, ed. by Domb C. and Lebowitz J.L. Acad.Press. New York 1983. V.7, P.151.
4. Доценко В.С. *Критические явления в спиновых стеклах с беспорядком* // УФН 1995. Т.165. P.481.

5. Паташинский А.З. Покровский В.Л. *Флуктуационная теория фазовых переходов*. М.: Наука, 1982.
6. Доценко В.С. *Современная теория критических явлений* // УФН 1993. Т.163. Р.1.
7. Соколов А.И. Шалаев Б.Н. *О критическом поведении модели Изинга с примесями* // ФТТ 1981. Т.23. Р.2058.
8. Jug G. *Critical behaviour of disordered spin systems in two and three dimensions* // Phys.Rev. 1983. B27. P.4518.
9. Pakhnin D.V., Sokolov A.I. *Five - loop renormalization - group expansion for the three - dimensional n - vector cubic model and critical exponents for impure Ising systems* // Phys. Rev. B. 2000. V.61. P.15130.
10. Pelissetto A., Vicari E. *Randomly dilute spin models: a six - loop field - theoretic study* // Phys. Rev. B. 2000. V.62. P.6393.
11. Tsyupin M.M. *Effective potential for scalar field in three dimensions: Ising models in the ferromagnetic phase* // Phys. Rev. B. 1997. V.55. P.8911.
12. Kim J.-K. *Critical renormalized coupling constants in the symmetric phase of the Ising models* // J. Phys. A: Math. Gen.2000. V.33. P.2675.
13. Гулд Х., Тобочник Я.К. *Компьютерное моделирование в физике: В 2 ч.* М.: Наука, 1989.
14. Wolff U. // Phys.Rev.Lett. 1989. **62**. P.361.
15. Salas J. Sokal A. *Exact Finite - Size - Scaling corrections to the critical two - dimensional Ising model on a torus* //J. Stat. Phys. 2000. V.98. P.551.
16. Heuer H.-O. *Monte Carlo simulation of disordered 3 - dimensional Ising systems* // Europhys. Lett. 1990. V.12. P.551.
17. Kim J.-K., de Souza A.J.F. and Landau D.P. *Numerical Computation of Finite Size Scaling Functions: An Alternative Approach to Finite Size Scaling* // Phys.Rev. 1996. E54. P.2291.
18. Ballesteros H.G., Fernandez L.A., Martin-Mayor V. et.al. *Critical exponents of the three dimensional diluted Ising model* // Phys. Rev. 1998. B58. P.2740.
19. Mayer I.O. Sokolov A.I. and Shalaev B.N. *Critical exponents for cubic and impure uniaxial crystals: most accurate theoretical values* // Ferroelectrics 1989. V.95. P.93.
20. Varnashev K.B. *The stability of a cubic fixed point in three dimensions from the renormalization group* // Phys.Rev. 2000. B61. P.14660.
21. Mayer I.O. *Critical exponents of the dilute Ising model from four-loop expansion*// J.Phys. 1989. A22. P.2815.
22. Pelissetto A. Vicari E. *Critical phenomena and renormalization-group theory* e-print cond-mat/0012164.
23. Dotsenko Vik.S., Harris A.B. Sherrington D. Stinchcombe R.B. *Self Avoiding Surfaces in the 3D Ising Model* // J.Phys. 1995. A28. P.3093; Dotsenko Vik.S. and Feldman D.E. *Replica Symmetry Breaking and the Renormalization Group Theory of the Weakly Disordered Ferromagnet* // J.Phys. 1995. A28. P.5183.
24. Прудников В.В., Прудников П.В., Федоренко А.А. *Устойчивость критического поведения слабо неупорядоченных систем к нарушению репличной симметрии* // Письма в ЖЭТФ 2001. Т.73. Р.153 ; Prudnikov V.V. Prudnikov P.V. Fedorenko A.A. *Stability of critical behaviour of weakly disordered systems with respect to the replica symmetry breaking* // Phys.Rev. 2001. B63. P.184201.