

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Крилицын*

*Омский государственный университет
644077, Омск, Россия*

Поступила в редакцию 27 февраля 2007 г.

Осуществлены численные исследования методом Монте-Карло критического поведения неупорядоченной ферромагнитной модели Изинга в широком интервале изменения концентрации немагнитных атомов примеси. Для образцов с различными спиновыми концентрациями и различными линейными размерами была определена температурная зависимость корреляционной длины и магнитной восприимчивости. С помощью метода конечноразмерного скейлинга для данных величин были определены скейлинговые функции, демонстрирующие универсальное поведение в критической области, а также вычислены критические температуры и статические критические индексы с использованием поправок к скейлингу. На основе выявленных концентрационных изменений скейлинговых функций и значений критических индексов сделан вывод о существовании двух универсальных классов критического поведения разбавленной модели Изинга с различными характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем.

PACS: 05.40.-a, 64.60.Fr, 75.10.Nk

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование критического поведения неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Большинство реальных твердых тел содержит замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на характеристики систем и может сильно модифицировать поведение систем при фазовых переходах. Это приводит к возникновению новых сложных явлений в структурно неупорядоченных системах, обусловленных эффектами аномально сильного взаимодействия флуктуаций ряда термодинамических величин, когда любое возмущение, вносимое дефектами структуры даже при их низкой концентрации, может привести к сильному изменению состояния системы. Для описания таких систем требуется разработка специальных аналитических и численных методов.

При изучении влияния структурного беспорядка на фазовые переходы второго рода возникают

два вопроса: изменяются ли критические индексы однородного магнетика при разбавлении его примесью немагнитных атомов, и если да, то являются ли новые критические индексы универсальными, т. е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции. Ответ на первый вопрос был дан в работе [1], где было показано, что критические индексы систем с замороженными дефектами структуры изменяются по сравнению с их однородными аналогами, если критический индекс теплоемкости однородной системы положителен. Этому критерию удовлетворяют лишь трехмерные системы, чье критическое поведение описывается моделью Изинга. Исследованиям ренормгрупповыми методами, численными методами Монте-Карло и экспериментальным исследованиям критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков к настоящему моменту посвящено значительное число работ (см. обзор [2]). И если на вопрос о существовании нового класса универсальности критического поведения, который образуют разбавленные изингоподобные магнетики, уже получен положительный ответ, то вопросы о независимости

*E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

асимптотических значений критических индексов от степени разбавления системы, мере влияния кроссоверных эффектов на эти значения, а также о возможности существования двух или более режимов критического поведения для слабо и сильно неупорядоченных систем остаются открытыми и горячо обсуждаются.

Настоящая работа посвящена численному исследованию критического поведения разбавленной трехмерной модели Изинга в широкой области изменения концентрации замороженных точечных дефектов. Высокие требования, предъявленные в процессе проведенных исследований к условиям моделирования, широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20-400$, рассмотренных в процессе исследования, выбранные температуры моделирования, исключительно близкие к критической температуре с $\tau = (T - T_c)/T_c = 5 \cdot 10^{-4}-10^{-2}$ и позволяющие выделить асимптотические значения характеристик, высокая статистика, использованная в процессе усреднения термодинамических и корреляционных функций по различным примесным конфигурациям, использование для обработки результатов моделирования методики конечноразмерного скейлинга [3], позволяющей наряду с асимптотическими значениями термодинамических функций получать для них скейлинговые функции, применение для выделения асимптотических значений критических индексов поправок к скейлингу, — все это позволяет авторам считать, что полученные результаты носят уникальный характер.

2. МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В работе рассматривается модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с линейным размером L и наложенными граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Изинга записывается в виде

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

где J_{ij} — короткодействующее обменное взаимодействие между закрепленными в узлах решетки спинами σ_i , принимающими значения ± 1 . Немагнитные атомы примеси образуют пустые узлы. Числа заполнения p_i при этом принимают значения 0 или 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(1 - p_i) \quad (2)$$

с $p = 1 - c$, где c — концентрация атомов примеси. Примесь равномерно распределяется по всей системе, и при моделировании ее положение фиксируется для отдельной примесной конфигурации. Нами рассматривались в процессе исследования неупорядоченные системы со значениями спиновых концентраций $p = 0.95, 0.80, 0.60, 0.50$.

Для снижения влияния эффектов критического замедления и корреляции различных спиновых конфигураций в работе был применен наиболее эффективный в этом смысле [4, 5] однокластерный алгоритм Вольфа. За один шаг Монте-Карло на спин (MCS) принималось от 10 до 20 переворотов кластера Вольфа в зависимости от линейного размера моделируемой решетки, спиновой концентрации системы и близости температуры к критической. Процедуре установления термодинамического равновесия в системе отводилось 10^4 шагов Монте-Карло и 10^5 шагов Монте-Карло отводилось на статистическое усреднение моделируемых величин при заданной примесной конфигурации. Для определения средних значений термодинамических и корреляционных функций наряду со статистическим усреднением применялось усреднение по различным примесным конфигурациям: для систем с $p = 0.95$ усреднение проводилось по 3000 образцов, для $p = 0.80$ — по 5000 образцов, для $p = 0.60, 0.50$ — по 10000 образцов.

В процессе моделирования различных спиновых систем на решетках с линейным размером L осуществлялся расчет корреляционной длины ξ_L и восприимчивости χ_L в соответствии со следующими соотношениями:

$$\xi_L = \frac{1}{2 \sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1}, \quad \chi_L = \frac{1}{pL^3} \overline{S^2}, \quad (3)$$

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

$$\Phi = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_i p_i \sigma_i \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,i}}{L}\right) \right|^2, \quad (4)$$

где $(x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i})$ — координаты i -го узла решетки, $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта сверху — усреднение по примесным конфигурациям. Была определена температурная зависимость $\xi_L(T)$ и $\chi_L(T)$ в температурном интервале $\tau = 5 \cdot 10^{-4}-10^{-2}$ для образцов с $p = 0.95$ и линейными размерами в интервале $L = 20-400$, для образцов с остальными спиновыми концентрациями температуры выбирались в интервале $\tau = 10^{-3}-10^{-2}$ при изменении L в интервале от

$L = 20$ до $L = 300$. При компьютерном моделировании значение L_{max} для каждой температуры ограничивалось тем размером решетки, при котором корреляционная длина и восприимчивость системы выходили на свои асимптотические значения.

В соответствии с работами [4, 5] и проведенными нами исследованиями выбранные условия моделирования обеспечивают гарантированное получение равновесных значений измеряемых термодинамических величин для всех рассмотренных размеров решеток и спиновых концентраций, так как времена автокорреляции для намагниченности и энергии даже для самых близких из выбранных температур к критической оказываются не больше десяти шагов Монте-Карло на спин с учетом выбранного за шаг числа переворотов кластера Вольфа.

3. МЕТОД КОНЕЧНОРАЗМЕРНОГО СКЕЙЛИНГА

Известно, что настоящий фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц в ней стремятся к бесконечности. Для определения асимптотических значений термодинамических величин $A(T)$, испытывающих аномальное поведение вблизи критической температуры, по их значениям $A_L(T)$, определяемым на конечных решетках, широко используются представления теории скейлинга об обобщенной однородности термодинамических функций в критической области относительно масштабных преобразований системы, на основе которых были развиты различные методы конечноразмерного скейлинга. В данной работе был применен метод, предложенный в работе [3] и апробированный авторами на анализе результатов моделирования критического поведения двумерной и трехмерной однородных моделей Изинга.

Идея метода [3] заключается в том, что в соответствии с теорией скейлинга размерная зависимость некоторой термодинамической величины A_L , определенной на конечной решетке, в отсутствие внешнего магнитного поля может быть представлена в критической области в виде

$$A_L(\tau) = L^{\delta/\nu} f_A(s_L(\tau)), \quad s_L(\tau) = L/\xi_L(\tau), \quad (5)$$

где δ — критический индекс для термодинамической величины $A(\tau) \propto \tau^{-\delta}$. С учетом того, что корреляционная длина в критической области ведет себя как $\xi(\tau) \propto \tau^{-\nu}$, можно записать

$$L^{\delta/\nu} = A(\tau) s_L^{\delta/\nu}(\tau). \quad (6)$$

В результате (5) может быть записано в виде

$$A_L(\tau) = A(\tau) F_A(s_L(\tau)), \quad (7)$$

где связь между скейлинговыми функциями f_A и F_A задается в виде соотношения

$$F_A(s_L(\tau)) = s_L^{\delta/\nu}(\tau) f_A(s_L(\tau)). \quad (8)$$

Когда в качестве величины A выступает корреляционная длина ξ , то уравнение (7) задает $\xi_L(\tau)/L$ как функцию только от $\xi(\tau)/L$. Это приводит к соотношению, позволяющему определять асимптотическое значение любой термодинамической величины посредством измеряемых значений A_L и скейлинговой функции от $x_L(\tau) = \xi_L(\tau)/L$,

$$A(\tau) = A_L(\tau)/Q_A(x_L(\tau)), \quad (9)$$

где функция $Q_A(x_L(\tau))$ задается выражением

$$Q_A(x_L(\tau)) = F_A(f_\xi^{-1}(x_L(\tau))). \quad (10)$$

Скейлинговая функция $Q_A(x_L)$, определяемая в интервале $0 \leq x_L \leq x_c$ с x_c — значением аргумента, не зависящим от L в критической области, должна удовлетворять следующим асимптотическим условиям: $\lim_{x \rightarrow 0} Q_A(x) \rightarrow 1$ и $\lim_{x \rightarrow x_c} Q_A \rightarrow 0$.

Для того чтобы удовлетворить асимптотическим условиям, мы по аналогии с работой [3] выбирали скейлинговую функцию для восприимчивости и корреляционной длины как в виде полиномиальной зависимости от x , так и от $\exp(-1/x)$:

$$Q_A(x) = 1 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4, \quad (11)$$

$$Q_A(x) = 1 + c_1 e^{-1/x} + c_2 e^{-2/x} + c_3 e^{-3/x} + c_4 e^{-4/x}, \quad (12)$$

с подбираемыми по методу наименьших квадратов коэффициентами c_n для каждой температуры T .

В данной работе была реализована следующая схема конечноразмерного скейлинга.

1. Для произвольного τ_0 в критической области температур измерялись величины $A_L(\tau_0)$ и $x(L, \tau_0) = \xi_L(\tau_0)/L$ для решеток с увеличивающимся размером L .

2. Термодинамическое значение величины $A(\tau_0)$ определялось как значение $A_L(\tau_0)$, которое оказывается не зависящим от L в пределах погрешностей измерения.

3. Осуществлялась процедура обработки данных измерения для $A_L(\tau_0)/A(\tau_0)$ методом наименьших квадратов с целью определения соответствующей

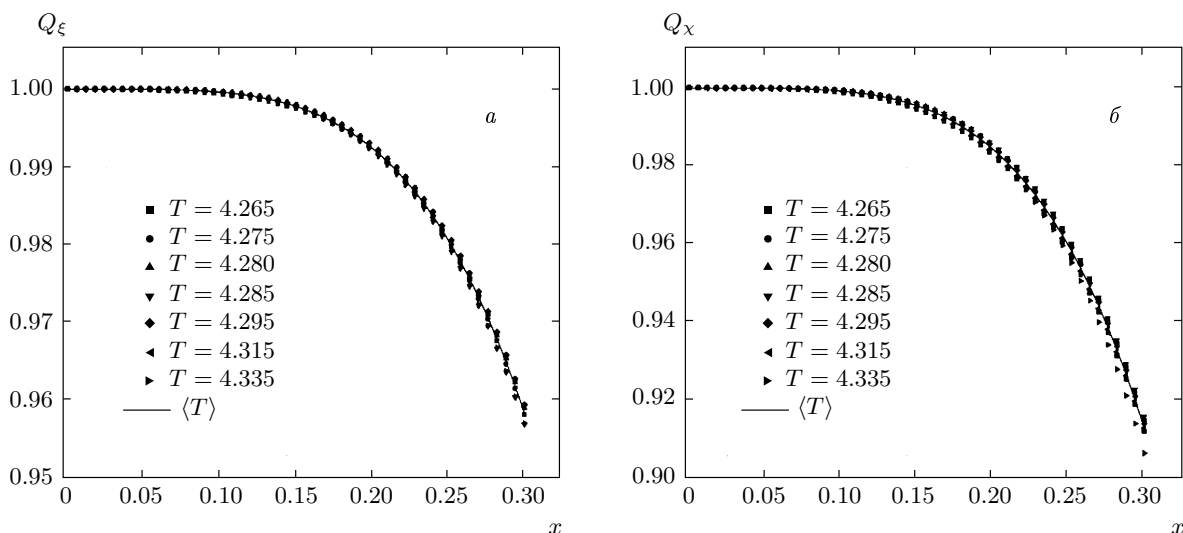


Рис. 1. Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации

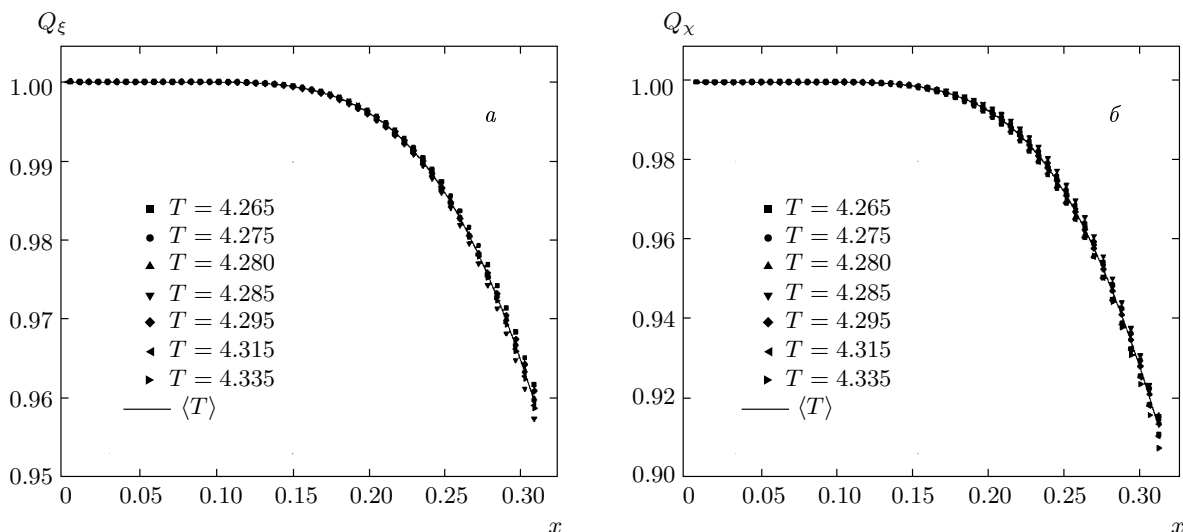


Рис. 2. Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

функциональной формы для скейлинговой функции $Q_A(x(L, \tau_0))$.

4. Процедура повторялась для других τ в области с $\tau \approx 10^{-3}-10^{-2}$.

5. Определялась усредненная скейлинговая функция Q_{aver}^A на основе функций $Q_A(x(L, \tau_i))$, найденных для различных температур τ_i при фиксированной спиновой концентрации p образцов.

6. Определялась температурная зависимость для асимптотических значений термодинамической ве-

личины посредством подстановки $A_L(\tau)$ и Q_{aver}^A в соотношение (9).

В качестве примера на рис. 1–4 для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.50$ представлены скейлинговые функции для корреляционной длины ξ и восприимчивости χ , полученные для различных температур с использованием полиномиальной аппроксимации от переменной x (рис. 1, 3) и от переменной $\exp(-1/x)$ (рис. 2, 4). На рисунках видно, что скейлинговые функции демонстриру-

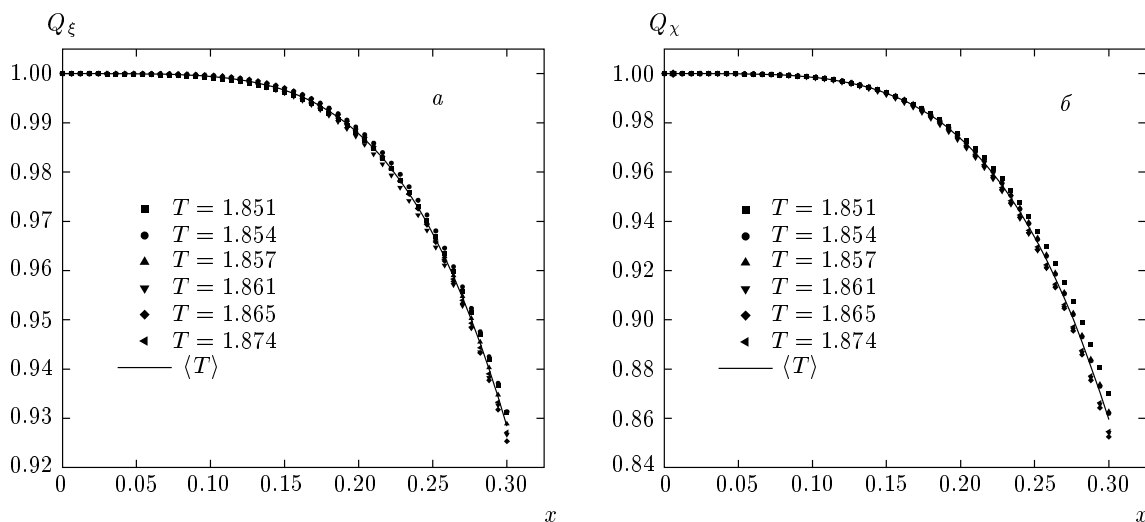


Рис. 3. Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.50$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации

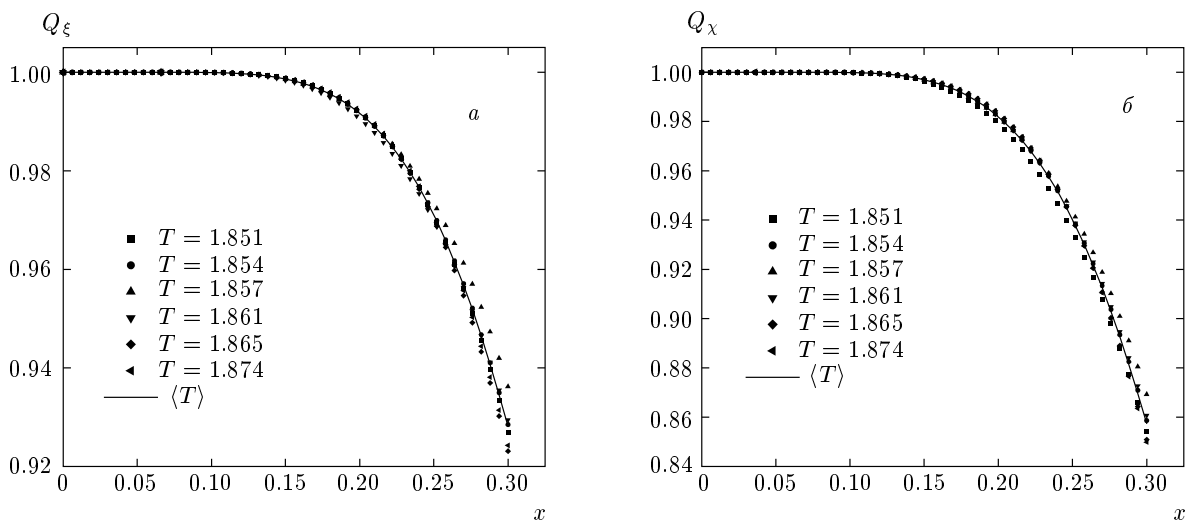


Рис. 4. Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.50$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

ют стремление к единой для каждой спиновой концентрации p универсальной кривой во всей области изменения скейлинговой переменной x_L .

На сводных рис. 5 и 6 представлены усредненные скейлинговые функции для корреляционной длины и восприимчивости для различных спиновых концентраций p , полученные с использованием полиномиальной аппроксимации от x (рис. 5) и от $\exp(-1/x)$ (рис. 6). Усредненные скейлинговые функции демонстрируют тенденцию, указывающую на возможное существование двух классов универ-

сального критического поведения для разбавленной модели Изинга с различным характером их поведения для слабо ($p = 0.95, 0.80$) и сильно ($p = 0.60, 0.50$) неупорядоченных систем.

В табл. 1 приведены асимптотические значения $\xi(T)$ и $\chi(T)$, полученные с использованием усредненных скейлинговых функций для различных температур и различных спиновых концентраций. Погрешности значений $\xi(T)$ и $\chi(T)$ учитывают статистические погрешности измеренных величин $\xi_L(T)$ и $\chi_L(T)$ и погрешности аппроксимаций.

Таблица 1. Асимптотические значения корреляционной длины и восприимчивости, полученные при использовании скейлинговых функций с полиномиальной зависимостью от x (pol) и $\exp(-1/x)$ (exp)

$p = 0.95$					$p = 0.80$				
T	ξ		χ		T	ξ		χ	
	pol	exp	pol	exp		pol	exp	pol	exp
4.265	62.44(15)	62.31(15)	14467(80)	14359(81)	3.51	26.16(9)	26.11(9)	2612(17)	2603(18)
4.275	21.25(5)	21.19(6)	1748(16)	1724(12)	3.52	16.50(4)	16.46(4)	1060(5)	1055(5)
4.280	17.06(4)	17.02(4)	1130(4)	1126(5)	3.53	12.51(2)	12.49(3)	618(2)	615(2)
4.285	14.41(3)	14.38(3)	819(3)	813(4)	3.54	10.31(2)	10.30(2)	424(2)	423(2)
4.295	11.40(2)	11.38(2)	515(2)	513(2)	3.55	8.79(3)	8.76(3)	312(2)	310(2)
4.315	8.37(2)	8.36(2)	282(2)	281(2)	3.57	7.01(3)	7.00(3)	201(2)	200(1)
4.335	6.76(2)	6.76(2)	187(1)	187(1)					
$p = 0.60$					$p = 0.50$				
2.430	46.03(15)	45.86(13)	7943(55)	7881(47)	1.851	49.55(46)	49.04(38)	9456(356)	9169(165)
2.435	29.37(7)	29.29(7)	3289(17)	3268(15)	1.854	36.38(12)	36.34(16)	5036(36)	5030(43)
2.440	22.49(8)	22.40(8)	1953(15)	1937(14)	1.857	29.57(9)	29.48(11)	3365(26)	3349(25)
2.445	18.33(5)	18.27(5)	1308(7)	1298(7)	1.861	23.86(6)	23.81(7)	2209(12)	2199(12)
2.450	15.70(4)	15.65(5)	967(5)	961(5)	1.865	20.23(4)	20.17(4)	1603(6)	1592(6)
2.460	12.41(4)	12.37(4)	611(4)	608(4)	1.874	15.38(3)	15.35(3)	939(4)	934(3)

4. РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Асимптотический критический индекс термодинамической величины $A(\tau)$ описывается выражением

$$\delta = - \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln A(\tau)}{\ln |\tau|}, \quad A(\tau) = A_{\pm} |\tau|^{-\delta}, \quad (13)$$

где A_+ и A_- — критические амплитуды соответственно выше и ниже критической температуры. Степенной закон типа (13) является точным лишь в пределе $\tau \rightarrow 0$. Для расчета критических индексов в промежуточном неасимптотическом режиме необходимо вводить дополнительные поправочные слагаемые к степенному закону (13). В соответствии с разложением Вегнера [6]:

$$A(\tau) = (A_0 + A_1 \tau^{\omega\nu} + A_2 \tau^{2\omega\nu} + \dots) \tau^{-\delta} \quad (\tau > 0), \quad (14)$$

где A_i — неуниверсальные амплитуды, ω — критический индекс поправки к скейлингу. В настоящей работе для расчета характеристик критического поведения для неупорядоченных систем мы ограничились учетом первой поправки к асимптотическому

поведению для корреляционной длины и восприимчивости:

$$\xi(\tau) = \tau^{-\nu} (A_0^{\xi} + A_1^{\xi} \tau^{\theta}), \quad \theta = \omega\nu, \quad (15)$$

$$\chi(\tau) = \tau^{-\gamma} (A_0^{\chi} + A_1^{\chi} \tau^{\theta}), \quad (16)$$

и провели расчет значений критических индексов ν , γ и θ , а также критических температур, используя метод наименьших квадратов для наилучшей аппроксимации данных из табл. 1 выражениями (15) и (16). В табл. 2 представлены полученные для различных спиновых концентраций p значения критических характеристик при использовании исходных данных, соответствующих различным аппроксимациям для скейлинговых функций, а также их усредненные по аппроксимациям значения. Видно, что критические индексы образуют две группы, близкие по значениям в пределах погрешностей вычисления: одна группа с $p = 0.95, 0.80$, т. е. для слабо неупорядоченных систем со спиновыми концентрациями p , большими порога примесной перколяции p_{imp} (для кубических систем $p_{imp} = 0.69$), другая с $p = 0.60, 0.50$, для сильно неупорядоченных систем с $p_c < p < p_{imp}$, где p_c — порог спиновой перколяции (для кубических систем $p_c = 0.31$),

Таблица 2. Значения критических характеристик для двух типов аппроксимаций (pol) и (exp) и их усредненные (aver) значения для систем с различными спиновыми концентрациями p

		ν	γ	θ^ξ	θ^x	T_c^ξ	T_c^x
$p = 0.95$	pol	0.6883(15)	1.3339(25)	0.141(52)	0.152(50)	4.26264(4)	4.26269(3)
	exp	0.6935(26)	1.3430(33)	0.113(64)	0.142(54)	4.26265(5)	4.26270(3)
	aver	0.6909(33)	1.3385(54)	0.137(56)	—	4.26267(4)	—
$p = 0.80$	pol	0.6960(29)	1.3473(30)	0.180(107)	0.193(74)	3.49937(21)	3.49954(14)
	exp	0.6947(28)	1.3421(30)	0.147(94)	0.192(71)	3.49940(21)	3.49961(14)
	aver	0.6956(29)	1.3447(40)	0.178(87)	—	3.49948(18)	—
$p = 0.60$	pol	0.7272(37)	1.4253(34)	0.221(147)	0.201(63)	2.42409(11)	2.42404(6)
	exp	0.7233(24)	1.4054(43)	0.184(92)	0.192(109)	2.42414(8)	2.42423(7)
	aver	0.7253(36)	1.4154(107)	0.199(103)	—	2.42413(9)	—
$p = 0.50$	pol	0.7372(25)	1.4299(26)	0.164(159)	0.195(74)	1.84503(7)	1.84512(3)
	exp	0.7368(26)	1.4266(30)	0.242(96)	0.226(66)	1.84503(7)	1.84519(3)
	aver	0.7370(33)	1.4283(33)	0.207(100)	—	1.84509(6)	—

когда в системе существуют два взаимопроникающих протекающих кластера — спиновый и примесный. Фрактальные эффекты этих двух пронизывающих друг друга кластеров могут явиться причиной изменения характера критического поведения для сильно неупорядоченных систем. В качестве итоговых можно рассматривать усредненные значения критических индексов $\nu = 0.693(5)$, $\gamma = 1.342(7)$, $\theta = 0.157(92)$ для слабо неупорядоченных систем и $\nu = 0.731(11)$, $\gamma = 1.422(12)$, $\theta = 0.203(106)$ для сильно неупорядоченных систем. Отметим, что полученные значения критических индексов для слабо неупорядоченных систем хорошо соотносятся со значениями $\nu = 0.678(10)$, $\gamma = 1.330(17)$, $\theta = 0.170(71)$ ($\omega = 0.25(10)$), полученными в [7] ренормгрупповыми методами в шестипетлевом приближении и справедливыми лишь для систем с малыми концентрациями примесей.

Полученные значения критических индексов ν и γ находятся также в достаточно хорошем согласии с имеющимися результатами экспериментальных исследований разбавленных изингоподобных магнетиков (табл. 3).

В табл. 4 представлены наиболее современные результаты различных авторов по моделированию методом Монте-Карло критического поведения разбавленной модели Изинга. В каждой из цитируемых работ есть свои достоинства, связанные с использованием различных методик обработки результатов моделирования, но и свои недостатки, связанные или с

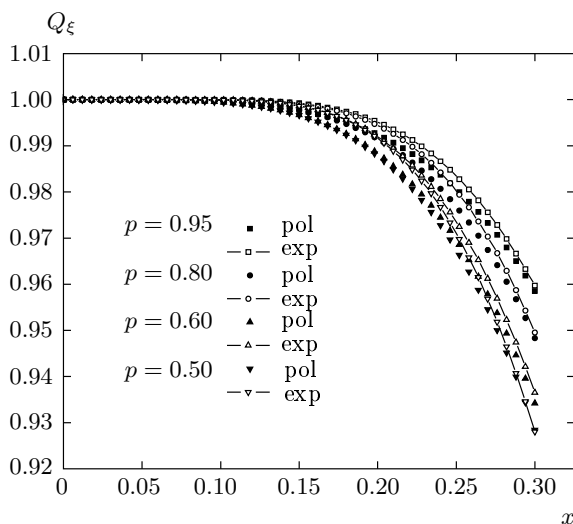


Рис. 5. Усредненные скейлинговые функции для корреляционной длины, полученные с использованием полиномиальной от x (символы) и от $\exp(-1/x)$ (сплошные линии) аппроксимаций

малыми размерами рассматриваемых решеток, что не обеспечивает надежного определения асимптотических значений измеряемых величин, или с недостаточностью статистики усреднения по различным примесным конфигурациям для получения достоверных результатов, или с учетом влияния неасимптотических поправок к скейлингу при проведении

Таблица 3. Экспериментально измеренные разными авторами значения критических индексов ν и γ в материалах, соответствующих неупорядоченной модели Изинга

Работы	$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$ \tau $	ν	γ
[8]	$p = 0.60$	$10^{-1} - 2 \cdot 10^{-3}$	0.73(3)	1.44(6)
	$p = 0.50$	$2 \cdot 10^{-2} - 2 \cdot 10^{-3}$		
[9]	$p = 0.46$	$10^{-1} - 1.5 \cdot 10^{-3}$	0.69(1)	1.31(3)
[10]	$p = 0.93$		0.71(1)	1.35(1)
[11]	$p = 0.93$	$10^{-2} - 1.14 \cdot 10^{-4}$	0.70(2)	1.34(6)
	$\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$ \tau $	ν	γ
	$p = 0.75$	$2 \cdot 10^{-1} - 4 \cdot 10^{-4}$	0.715(35)	1.364(76)
[12]	$p = 0.50$	$1 \cdot 10^{-1} - 5 \cdot 10^{-3}$	0.75(5)	1.57(16)

Таблица 4. Значения критических индексов ν и γ , полученные разными авторами моделированием по методу Монте-Карло

Работы	L_{max}	p	ν	γ	$\theta = \omega\nu$
[13]	300	0.8		1.36(4)	
[14]	60	0.95	0.64(2)	1.28(3)	
		0.9	0.65(2)	1.31(3)	
		0.8	0.68(2)	1.35(3)	
		0.6	0.72(2)	1.51(3)	
[15]	64	0.8	0.682(3)	1.357(8)	
	80	0.6	0.717(7)	1.508(28)	
[16]	128	$0.4 \leq p \leq 0.9$	0.6837(53)	1.342(10)	0.253(43)
[17]	256	0.8	0.683(3)	1.336(8)	0.581(85)
[18]	96	0.85	0.662(2)	1.314(4)	
[19]	60	0.95	0.646(2)	1.262(2)	
		0.9	0.664(2)	1.285(3)	
		0.8	0.683(4)	1.299(3)	
		0.6	0.725(6)	1.446(4)	

процедуры расчета критических индексов, необходимость учета которых особенно важна для образцов со спиновыми концентрациями $p = 0.95, 0.90$ и сильно неупорядоченных систем. Результаты работ [14, 19] можно рассматривать как подтверждающие наши выводы, идеи которых были высказаны нами еще в ранних работах [20] по компьютерному моделированию критической динамики неупорядоченной модели Изинга. Результаты работы [16] при всей привлекательности поддерживаемой ее авторами идеи о едином универсальном критическом

поведении с асимптотическими значениями критических индексов, не зависящими от спиновой концентрации, не дали возможности на самом деле адекватно объяснить полученные ими результаты для образцов с $p = 0.90$ при использовании единого для всех систем критического индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.37(6)$, хотя полученные в [16] неасимптотические значения критических индексов демонстрировали явную зависимость от p и позволяли при отказе от единого ω получить два набора асимптотических критических индексов для слабо и сильно

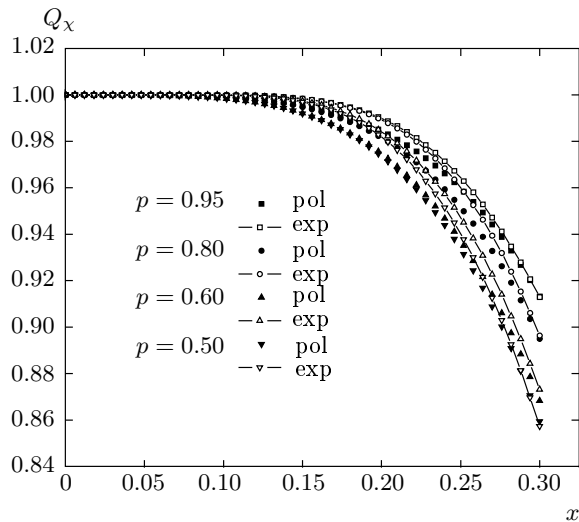


Рис. 6. Усредненные скейлинговые функции для восприимчивости, полученные с использованием полиномиальной от x (символы) и от $\exp(-1/x)$ (сплошные линии) аппроксимаций

неупорядоченных систем. Результаты остальных работ, выполненных на образцах лишь с единственной спиновой концентрацией, как правило, в пределах погрешности перекрываются с нашими результатами, хотя есть и несоответствия, обусловленные скорее всего недостатками, высказанными выше.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

— скейлинговые функции и значения критических индексов для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального критического поведения для разбавленной модели Изинга с различными характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем;

— полученные значения критических индексов для слабо неупорядоченных систем находятся в хорошем согласии в пределах статистических погрешностей моделирования и применяемых численных аппроксимаций с результатами теоретико-полевого описания;

— результаты моделирования согласуются с результатами экспериментальных исследований критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков.

Авторы благодарят Д. П. Ландау, М. Новотного, В. Янке, Н. Ито за полезные обсуждения результатов работы во время III Международного семинара по вычислительной физике в Ханчжоу (ноябрь 2006, Китай). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 04-02-17524, 04-02-39000) и частично в рамках программы Президента РФ (грант № МК-8738.2006.2). Авторы благодарят Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. V. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. J. K. Kim, A. J. de Souza, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **54**, 2291 (1996).
4. M. Hennecke and U. Heyken, J. Stat. Phys. **72**, 829 (1993).
5. D. Ivaneyko, J. Ilnytskyi, B. Berche et al., E-print archives, cond-mat/0603521 (2006).
6. F. J. Wegner, Phys. Rev. B **5**, 4529 (1972).
7. A. Pelissetto and E. Vicari, Phys. Rev. B **62**, 6393 (2000).
8. R. J. Birgeneau, R. A. Cowly, G. Shirane et al., Phys. Rev. B **27**, 6747 (1983).
9. D. P. Belanger, A. R. King, and V. Jaccarino, Phys. Rev. B **34**, 452 (1986).
10. D. P. Belanger, Z. Slanic, and J. A. Fernandez-Baca, J. Magn. Magn. Mater **177-181**, 171 (1998).
11. Z. Slanic, D. P. Belanger, and J. A. Fernandez-Baca, Phys. Rev. Lett. **82**, 426 (1999).
12. P. W. Mitchell, R. A. Cowley, H. Yoshizawa et al., Phys. Rev. B **34**, 4719 (1986).
13. J. S. Wang, M. Wohlert, H. Muhlenbein et al., Physica A **166**, 173 (1990).
14. H. O. Heuer, J. Phys. A **26**, L333 (1993).
15. S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1998); Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998).
16. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor et al., Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
17. P. Calabrese, V. Martin-Mayor, A. Pelissetto et al., Phys. Rev. E **68**, 036136 (2003).
18. D. Ivaneyko, J. Ilnytskyi, B. Berche et al., Condens. Matter Phys. **8**, 149 (2005).
19. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
20. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, Письма в ЖЭТФ **55**, 709 (1992); ЖЭТФ **103**, 962 (1993).