

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образца
«Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»

На правах рукописи

Медведева Мария Александровна

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ
И РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА КРИТИЧЕСКОЕ
ПОВЕДЕНИЕ СЛОЖНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ**

01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
Прудников Павел Владимирович
доктор физико-математических наук,
профессор.

Омск – 2014

Оглавление

Введение	4
1 Фазовые переходы и критические явления.	13
1.1 Фазовые переходы.	13
1.2 Критические индексы.	14
1.2.1 Влияние дефектов структуры на критическое поведение.	17
1.3 Основные методы и алгоритмы для моделирования неупорядоченных систем.	21
1.3.1 Метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса.	21
1.3.2 Кластерные алгоритмы.	26
1.3.3 Модификация метода Монте-Карло для неупорядоченных систем.	28
1.3.4 Процедура линейной аппроксимации и оценка погрешности измерений.	29
2 Численное исследование слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов с учетом различных начальных состояний.	31
2.1 Введение	31
2.2 Описание модели	37
2.3 Определение критической температуры слабо неупорядоченной модели Гейзенберга	39
2.4 Релаксация из полностью упорядоченного начального состояния с $m_0 = 1$	42
2.5 Эволюция из высокотемпературного начального состояния $m_0 \ll 1$	49
2.6 Основные результаты и выводы	58
3 Критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнедействующей корреляцией дефектов.	60
3.1 Введение	60
3.2 Равновесные характеристики сильно неупорядоченной модели Гейзенберга	62
3.3 Исследование неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Гейзенберга из начального низкотемпературного состояния	68

3.4	Исследование эффектов старения	73
3.5	Основные результаты и выводы	77
4	Численное исследование критических свойств тонких магнитных пленок.	78
4.1	Введение	78
4.2	Анизотропная модель Гейзенберга	80
4.3	Спин ориентационный переход	86
4.4	Размерные эффекты в критическом поведении тонких пленок	87
4.5	Основные результаты и выводы	94
	Заключение.	95
	Литература	97

Введение

Особенности поведения макроскопических систем в окрестности температуры фазового перехода второго рода определяются сильным взаимодействием долгоживущих флуктуаций параметра порядка [1–4]. Так, слабое возмущение в окрестности критической точки может вызывать аномально сильный отклик и приводить к новым физическим эффектам. В этом плане, наиболее неожиданные явления возникают при рассмотрении влияния различных неравновесных начальных условий на аномально медленную релаксацию системы в критической области.

Реальные твердые тела содержат замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на характеристики систем. В большинстве работ исследование ограничивается рассмотрением точечных, пространственно некоррелированных дефектов. В то же время вопрос о влиянии на критическое поведение эффектов корреляции дефектов значительно менее исследован. В рамках этой же проблемы можно поставить вопрос о влиянии на критическое поведение протяженных дефектов, таких как поверхности кристалла, дислокации или плоские дефекты структуры, возникающие, например, на границе зерен. Можно ожидать, что дальнедействующая корреляция в пространственном распределении дефектов может модифицировать критические свойства неупорядоченных систем.

Смещение исследований в современной физике твердого тела в область микромасштабов вызвало необходимость понимания тонких явлений связанных с наличием протяженных дефектов структуры типа дислокаций, границ зерен, примесных комплексов и т.д. Все эти особенности представляют собой проявление пространственно скоррелированных неоднородностей.

В силу этого к моделям систем с дальнедействующей корреляцией дефектов существует несомненный интерес как с общетеоретической точки

зрения выявления новых типов критического поведения, так и с точки зрения реальной возможности проявления дальнедействующей корреляции дефектов в полимерах [5], при переходе в сверхтекучее состояние ^4He в пористой среде – аэрогеле [6], в ориентационных стеклах [7], в неупорядоченных твердых телах с дефектами фракталоподобного типа [8] и при описании дислокаций на поверхности [9].

Известно, что в критической точке наряду с особенностями равновесных характеристик сингулярное поведение демонстрируют кинетические коэффициенты и динамические функции отклика, что обусловлено аномально большими временами релаксации сильно флуктуирующих величин. Однако исследование динамических свойств критических флуктуаций сталкивается с трудностями более сложными, чем при описании равновесных характеристик. Это вызвано необходимостью учета взаимодействия флуктуаций параметра порядка с другими долгоживущими возбуждениями. В этом плане, динамическое критическое поведение модели Гейзенберга значительно менее изучено по сравнению с исследованиями статических свойств [10]. Модель Гейзенберга, описывающая важный класс изотропных магнетиков, является наиболее распространенной моделью при описании реальных магнетиков. Фактически, анизотропный вариант модели Гейзенберга используется для описания таких сплавов, как K_2NiF_4 [11], $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ [12], $\text{BaNi}_2(\text{PO}_4)_2$ [13], $\text{CoCl}_2 - \text{GIC}$ [14] и Rb_2CrCl_4 [15].

При исследовании неравновесных свойств гейзенберговских магнетиков наличие дальнедействующей корреляции дефектов может привести к проявлению эффектов старения и нарушению флуктуационно-диссипативного отношения [16–18].

В работе Вейнриба и Гальперина [19] представлена модель изотропной неупорядоченной системы с дальнедействующей корреляцией дефектов. Было показано, что дефекты, обладающие свойством дальней пространственной корреляции, изменяют критическое поведение не только систем с однокомпонентным параметром порядка, как в случае точечных дефектов, но и систем с многокомпонентным параметром порядка. В работе [20] было осуществлено теоретико-полевое описание трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов и было подтверждено

ее влияние на критическое поведение таких систем. Однако ренормгрупповое описание не позволяет учесть влияние дефектов структуры высокой концентрации. Компьютерное моделирование позволяет провести исследование неупорядоченных систем в широком диапазоне концентраций дефектов структуры.

Понимание критических явлений в низкоразмерных структурах может быть достигнуто путем изучения ультратонких пленок. Исследование тонких пленок имеет большое технологическое значение в связи с применением в магнитных устройствах хранения данных [21]. Процессы магнитного упорядочения в ультратонких ферромагнитных пленках очень сложны из-за сильного влияния формы и кристаллографической анизотропии подложки. За последние годы появилось большое количество экспериментальных работ, посвященных исследованиям магнитных свойств низкоразмерных систем [22]. Тем не менее остались без ответа такие вещи, как тип магнитного упорядочения при низких температурах. В связи с этим компьютерное исследование модельных статистических систем имеет важное значение для описания свойств ультратонких магнитных пленок.

В связи с выше изложенным целью настоящей диссертации является:

1. Исследование влияния дальнедействующей корреляции дефектов структуры на неравновесное поведение неупорядоченных систем при фазовом переходе второго рода посредством изучения трехмерной неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами методом коротковременной динамики.
2. Численное исследование неравновесного критического поведения характеристик слабо и сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами с учетом влияния различных начальных состояний. Расчет универсальных критических показателей и сравнение с результатами теоретических расчетов.
3. Исследование равновесного критического поведения тонких магнитных пленок. Определение значений универсальных показателей, определяющих магнитное упорядочение в тонких пленках. Исследо-

вание перехода от двумерных к трехмерным критическим свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

Научная новизна результатов.

1. Впервые осуществлено компьютерное моделирование неравновесного критического поведения трехмерной модели Гейзенберга с дальней пространственной корреляцией дефектов в коротковременном режиме. При исследовании критической релаксации модели из различных начальных состояний системы определены значения совокупности динамических и статических универсальных критических показателей при применении методики учета поправок к скейлингу. Полученные результаты позволяют сделать вывод о существенности влияния дальней пространственной корреляции дефектов на критическое поведение и о существовании различных классов универсального критического поведения для рассматриваемых систем, отвечающих областям слабой и сильной структурной неупорядоченности.

2. Впервые продемонстрировано при сопоставлении результатов компьютерного моделирования неравновесного критического поведения трехмерной модели Гейзенберга с дальней пространственной корреляцией дефектов в коротковременном режиме и ее равновесного критического поведения, что метод коротковременной динамики может служить надежной альтернативой традиционным методам Монте-Карло не только при численных исследованиях однородных систем, но и систем со структурным беспорядком, обеспечивая при меньших машинных затратах получение более полной информации о критическом поведении структурно неупорядоченных систем.

3. Впервые проведено исследование равновесного критического поведения характеристик тонких ферромагнитных пленок посредством изучения анизотропной модели Гейзенберга, позволяющее определить значение температуры фазового перехода в зависимости от толщины пленки. Полученные результаты позволяют сделать вывод о существовании перехода от двумерных к трехмерным свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

Научная и практическая значимость работы.

Научная значимость диссертации обусловлена необходимостью выявления влияния дальнедействующей корреляции структурных дефектов на критическое поведение спиновых систем и разработки методик анализа данных, получаемых при моделировании поведения систем.

Выявленное в результате проведенных расчетов существенное влияние дефектов структуры на характеристики критического поведения различных систем могут найти применение при отработке методики и постановке реальных физических и компьютерных экспериментов, а также практическом использовании направленной модификации свойств материалов, испытывающих фазовые превращения, за счет их легирования, что служит научной основой для создания материалов с новыми, перспективными физико-химическими свойствами.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Методика численного исследования неравновесного критического поведения структурно неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с дальней пространственной корреляцией дефектов в коротковременном режиме и методика определения значений универсальных критических показателей с учетом ведущих поправок к скейлингу.

2. Наличие нескольких этапов динамического развития слабо неупорядоченных систем после микроскопического временного масштаба: области с характеристиками однородной системы, кроссоверной области и области, характеризующейся влиянием структурного беспорядка.

3. Подтверждение расширенного критерия Харриса о влиянии дефектов с дальней пространственной корреляцией на критическое поведение не только изингоподобных систем, но и систем с многокомпонентным параметром порядка (на примере модели Гейзенберга).

4. Методика численного исследования равновесного критического поведения тонких магнитных пленок посредством изучения анизотропной модели Гейзенберга и методика расчета критических показателей.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на XI Всероссийской молодежной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, 2010), на региональных научно-практических конферен-

циях «Молодежь третьего тысячелетия» (Омск, 2011, 2012, 2013), на Moscow International Symposium on Magnetism (MISM) (Moscow, 2011), на Восемнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-18, Красноярск, 2012), на VIII Международной научно-технической конференции «Динамика систем, механизмов и машин» (Омск, 2012), на научно-практическом семинаре «Вычислительная физика и суперкомпьютерные технологии 2012» (Омск, 2012), на «XXV IUPAP Conference on Computational Physics» (Moscow, 2013), а также на научных семинарах кафедры теоретической физики ОмГУ.

Публикации.

1. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. Non-equilibrium critical relaxation of the 3D Heisenberg magnets with long-range correlated disorder. // Progress of Theoretical Physics. - 2012. – Vol. 127. – No. 3. – P. 369 – 382.

2. Medvedeva M., Prudnikov P. Non-equilibrium critical relaxation of Heisenberg ferromagnets with long-range correlated defects. // Solid State Phenomena. - 2012. – Vol. 190. – P. 39 – 42.

3. Прудников П.В., Медведева М.А. Неравновесное критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнодействующей корреляцией дефектов. // Физика низких температур. - 2014. - Т. 40. - Вып. 5.

4. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. Monte Carlo simulation of critical properties of ultrathin anisotropic Heisenberg films. // Journal of Physics: Conference Series, 2014.

5. Prudnikov P.V., Elin A.S., Medvedeva M.A. Non-equilibrium critical behaviour of ultrathin magnetic and metamagnetic Ising films. // Journal of Physics: Conference Series, 2014.

6. Прудников П.В., Прудников В.В., Колесников В.Ю., Медведева М.А., Желтышев П.А. Численное исследование влияния протяженных дефектов структуры на критическое поведение трехмерных систем методом коротковременной динамики. // Труды Семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р. Р. Назирова.- М. Изд-во КДУ, 2009. - С. 264-278.

7. Прудников П.В., Медведева М.А., Шакирзянов Ф.Р. Численное исследование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных систем с протяженными дефектами структуры вблизи темпе-

ратуры фазового перехода второго рода. // Известия Казанского государственного архитектурно-строительного университета. - 2012. – Вып. 3 (21). – С. 209 - 215.

8. Прудников П.В., Медведева М.А. Компьютерное моделирование критического поведения характеристик сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами. // Вестник Омского университета. – 2012. – Вып. 2. – С. 87-91.

9. Прудников П.В., Медведева М.А. Численное исследование влияния протяженных дефектов структуры на критическую релаксацию трехмерной модели Гейзенберга. // Вестник Омского университета. – 2011. – Вып. 2. – С. 88-92.

10. Прудников П.В., Медведева М.А., Желтышев П.А. Численное исследование влияния эффектов корреляции дефектов структуры на критическую динамику модели Гейзенберга. // Вестник Омского университета. – 2010. – Вып. 4. – С. 70-75.

11. Прудников П.В., Медведева М.А., Желтышев П.А. Численное исследование неравновесного критического поведения трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами. // Вестник Омского университета. – 2009. – Вып. 4. – С. 108-113.

12. Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А., Желтышев П.А. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами методом коротковременной динамики. // Вестник Омского университета. - 2008. - Вып. 4. - С. 29-34.

13. Прудников П.В., Медведева М.А., Желтышев П.А. Программа расчета характеристик неравновесной критической динамики неупорядоченной модели Гейзенберга с протяженными дефектами структуры с применением параллельных методов // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011614137. - 2011. - Патентообладатель: ГОУ ВПО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

14. Прудников П.В., Медведева М.А. Программа численного моделирования на многопроцессорной вычислительной системе эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов // Свидетельство

о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012661125. - 2012. - Патентообладатель: ФГБОУ ВПО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

15. Прудников П.В., Прудников В.В., Медведева М.А. Программа моделирования на многопроцессорной вычислительной системе критических свойств ультратонких магнитных пленок на основе анизотропной модели Гейзенберга // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012661126. - 2012. - Патентообладатель: ФГБОУ ВПО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

16. Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А., Медведева М.А., Чабров А.В., Питеримов А.Ю. Программа расчета поправок к скейлингу критического поведения структурно неупорядоченных спиновых систем // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013614924. - 2013. - Патентообладатель: ФГБОУ ВПО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

17. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. Non-equilibrium critical relaxation of Heisenberg ferromagnets with long-range correlated defects. // Book of Abstracts: Moscow International Symposium on Magnetism (MISM), 2011. – P. 447 – 448.

18. Medvedeva M.A., Prudnikov P.V. Monte Carlo simulation of critical properties of ultrathin anisotropic Heisenberg films. // Book of abstract XXV IUPAP Conference on Computational Physics, 2013. – P. 43.

19. Prudnikov P.V., Elin A.S., Medvedeva M.A. Non-equilibrium critical behaviour of ultrathin magnetic and metamagnetic Ising films // Book of abstracts: XXV IUPAP Conference on Computational Physics, 2013. – P. 45.

Настоящая диссертация включает в себя введение, четыре главы, заключение и список цитируемой литературы.

В первой главе, носящей обзорный характер, в краткой форме излагается содержание ряда концепций и методов, применяемых для описания критических явлений. Рассматривается влияние беспорядка с дальнедействующей корреляцией дефектов на критическое поведение систем. Представлен обзор существующих достижений в данной области.

Во второй главе осуществлено компьютерное моделирование как равновесного, так и неравновесного критического поведения для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с дальнедействи-

ющей корреляцией дефектов. Описана методика определения значений универсальных критических показателей с учетом ведущих поправок к скейлингу. Получено численное подтверждение о существовании влияния дальней пространственной корреляции дефектов на критическое поведение систем с трехкомпонентным параметром порядка.

В третьей главе исследовано влияние дефектов структуры большой концентрации на критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга. Показано, что слабо и сильно неупорядоченные модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов принадлежат к разным классам универсальности. Выявлено, что увеличение концентрации дефектов структуры с дальнедействующей корреляцией приводит к существенному замедлению процессов критической релаксации по сравнению с однородными и слабо неупорядоченными системами.

В четвертой главе представлены результаты исследования тонких ферромагнитных пленок в рамках анизотропной модели Гейзенберга. Выявлены размерные эффекты в поведении термодинамических величин. Выявлен переход от двумерных к трехмерным свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

В заключении сформулированы основные оригинальные результаты по итогам диссертационной работы.

Глава 1

Фазовые переходы и критические явления.

1.1 Фазовые переходы.

Фазой называется физически однородная часть системы, отличающаяся своими физическими свойствами от других ее частей и отделенная от них четко выраженной границей. Примером двухфазных систем могут служить жидкость и насыщенный пар, жидкость и кристалл, две кристаллические модификации одного и того же вещества, находящиеся в соприкосновении друг с другом, и т.д. В системе, в которой фазы находятся в равновесии, незначительное изменение внешних условий (например, подвод или отвод некоторого количества тепла) приводит к тому, что некоторое количество вещества переходит из одной фазы в другую (плавление, кипение и т.д.). Поэтому при изучении равновесия фаз, мы изучаем протекание фазовых переходов. Равенство химических потенциалов двух фаз определяет условие равновесия

$$\mu_1(T, P) = \mu_2(T, P). \quad (1.1)$$

Это равенство показывает, что при фазовом превращении химический потенциал изменяется непрерывно. Однако, его производные

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = -S, \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = V \quad (1.2)$$

при фазовом превращении меняются скачком. Такие фазовые переходы называются фазовыми переходами первого рода [23]. Также существуют фазовые переходы второго рода, при которых первые производные химического потенциала не имеют скачков (в точке перехода $S_1 = S_2, V_1 = V_2$), но скачком меняются вторые производные:

$$\left(\frac{\partial^2\mu}{\partial P^2}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T, \quad \left(\frac{\partial^2\mu}{\partial T^2}\right)_P = -\frac{C_P}{T}, \quad \frac{\partial^2\mu}{\partial P\partial T} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P, \quad (1.3)$$

таким образом, при фазовых переходах второго рода скачком меняются сжимаемость, коэффициент объемного расширения и теплоемкость. Точка на диаграмме состояний где происходит фазовый переход второго рода, называется критической точкой или точкой Кюри; соответствующая ей температура обозначается T_c [24]. Следует заметить, что в случае магнетика в качестве термодинамических параметров вместо P, V и T будут выступать H, M и T , и в уравнениях (1.1)-(1.3) следует произвести подстановки $V \rightarrow -M, P \rightarrow H$.

1.2 Критические индексы.

При изучении критических явлений большое внимание уделяется определению значений совокупности показателей степени, которые описывают степенное поведение различных интересующих нас термодинамических и корреляционных функций вблизи критической точки. Такие показатели получили название критических индексов. Стандартные обозначения этих величин были введены Фишером. Критические индексы исследовались в течение долгого времени различными методами: приближения высоких и низких температур, моделирование Монте-Карло, теоретико-полевой метод и т.д. В частности, вблизи критической точки $T \rightarrow T_c$ и $H \rightarrow 0$ неоднократно исследовались индексы:

1. Индекс $\gamma > 0$, определяющий закон изменения восприимчивости

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (1.4)$$

2. Индекс $\beta > 0$, определяющий закон стремления к нулю параметра порядка (для ферромагнитных систем намагниченности)

$$\phi \sim -(T - T_c)^\beta. \quad (1.5)$$

3. Индекс $\nu > 0$, определяющий температурную зависимость корреляционной длины

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}. \quad (1.6)$$

4. Индекс α , определяющий температурную зависимость теплоемкости

$$C(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha}. \quad (1.7)$$

5. Индекс η , определяющий закон убывания статистической корреляционной функции флуктуаций спиновой плотности $S(r)$ с расстоянием при $T = T_c$

$$G(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}. \quad (1.8)$$

Еще ряд индексов вводится для описания свойств тела при наличии внешнего поля.

1. Индекс $\delta > 0$, определяющий зависимость параметра порядка от поля

$$\phi \sim H^{\frac{1}{\delta}}. \quad (1.9)$$

2. Индекс ϵ , определяющий зависимость теплоемкости от поля

$$C \sim H^{-\epsilon}. \quad (1.10)$$

3. Индекс $\mu > 0$, определяющий зависимость корреляционного радиуса от поля

$$r_c \sim H^{-\mu}. \quad (1.11)$$

Динамический критический индекс z , характеризующий асимптотическую зависимость времени релаксации системы, как и времени корреляции

ляции состояний, по мере приближения к критической температуре

$$\tau_{\text{rel}}, \tau_{\text{corr}} \sim |T_c - T|^{-z\nu}. \quad (1.12)$$

Критические индексы связаны друг с другом рядом точных соотношений. Часть из них является прямым следствием определений различных индексов. Вот, например, некоторые из соотношений, связывающие критические индексы :

1. неравенство Рашбрука

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (1.13)$$

2. неравенство Гриффитса

$$\alpha + \beta(\delta + 1) \geq 2, \quad (1.14)$$

3. неравенство Уидома

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1), \quad (1.15)$$

4. неравенство Бекингхема (d - размерность пространства)

$$\frac{d(\delta - 1)}{\delta + 1} \geq 2 - \eta, \quad (1.16)$$

5. неравенство Фишера

$$\nu(2 - \eta) \geq \gamma, \quad (1.17)$$

6. неравенство Джозефсона

$$\nu d \geq 2 - \alpha, \quad (1.18)$$

В большинстве случаев эти неравенства переходят в точные равенства.

$$\beta\delta = \beta + \gamma, \quad (1.19)$$

$$\epsilon(\beta + \gamma) = \alpha, \quad (1.20)$$

Равенства (1.19), (1.20) связывают друг с другом индексы, определяющие температурную зависимость термодинамических величин в слабых полях и их зависимость от H в сильных полях. Равенство определяющее поведение корреляционного радиуса:

$$\mu(\beta + \gamma) = \nu. \quad (1.21)$$

И равенство, выражающее индекс η через другие индексы:

$$\nu(2 - \eta) = \gamma. \quad (1.22)$$

Из (1.19)-(1.21) следуют равенства

$$\beta\delta\eta = \alpha, \quad (1.23)$$

$$\beta\delta\mu = \nu, \quad (1.24)$$

$$\eta\nu = \alpha\nu. \quad (1.25)$$

Не все индексы являются независимыми, зная значения всего двух индексов значения остальных индексов могут быть получены из выше приведенных соотношений.

1.2.1 Влияние дефектов структуры на критическое поведение.

В реальных макроскопических системах всегда присутствуют те или иные дефекты. Дефекты структуры могут иметь различную природу и оказывать совершенно различное влияние на процессы, протекающие в твердых телах, поэтому описание влияния дефектов структуры во всех возможных формах их проявления является одной из интересных и сложных проблем теории критических явлений. Так, например, в ферромагнитном кристалле часть ячеек может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент. Если концентрация немагнитных атомов превышает определенную величину, ферромагнетизм полностью подавляется.

Причина, по которой влияние примесей на критическое поведение ожидается существенным, состоит в следующем. Пусть в систему, находящуюся вблизи критической точки, ввели несколько примесей, включив тем самым малое возмущение. Отклик системы на это возмущение описывается на языке поведения различных восприимчивостей и корреляционных функций. Вблизи критической точки некоторые из этих величин велики и представляют собой сингулярные функции температуры. Следовательно, малое количество примесей может привести к большим эффектам вблизи критической точки, тем самым, существенно изменяя критическое поведение чистой системы. При этом могут измениться значения критических индексов. Возможно, что наличие дефектов приводит к сглаживанию сингулярного поведения некоторых величин. Может произойти размытие фазового перехода второго рода и исчезновение критической точки.

Дефекты принято разделять на два вида [25] по тому, как они распределены в решетке вещества. Если способ приготовления образца таков, что дефекты структуры находятся в термодинамическом равновесии с решеткой вещества системы, то их называют расплавленными или равновесными. Но обычно, при приготовлении образца дефекты не успевают прийти в термодинамическое равновесие с решеткой вещества и как бы "замораживаются" в ней в виде некоторой конфигурации, обусловленной способом приготовления образца. Такие дефекты принято называть замороженными.

В случае расплавленных дефектов структуры их концентрация играет роль дополнительной термодинамической переменной. Ее влияние на критическое поведение проявляется только лишь в сдвиге критической температуры и перенормировке значений критических индексов с фактором $1/(1 - \alpha)$, если индекс теплоемкости однородной системы α положителен [26].

Феноменологический подход к описанию универсального критического поведения систем определяется гамильтонианом H вида

$$H = \int d^d x \left(-h(x)\phi(x) + \frac{1}{2}r(x)\phi^2(x) + \frac{1}{2}(\nabla\phi(x))^2 + \frac{u(x)}{4!}\phi^4(x) + \dots \right) \quad (1.26)$$

где $\phi(x)$ - n -компонентный параметр порядка; h - внешнее поле, сопряженное параметру порядка; $r(T), u(T)\dots$ - аналитические функции температуры T и внешних параметров. Неоднородные системы с замороженными примесями уже не являются трансляционно-инвариантными. При этом параметры $h(x), r(x), u(x)$ начинают зависеть случайным образом от координат. Влияние случайности вызванное присутствием дефектов, уменьшается с уменьшением скейлинговой размерности полей:

$h(x)$ - случайное поле (со средним равным нулю), характеризуется наиболее сильным влиянием на поведение систем при фазовых переходах;

$r(x)$ - случайное поле локальной критической температуры при определенных условиях может модифицировать критическое поведение систем и изменить значения критических индексов (отличное от нуля среднее просто сдвигает критическую температуру);

$u(x)$ - влияние этих полей на критическое (асимптотическое) поведение термодинамических функций несущественно.

В данной диссертационной рассматривается влияние дефектов структуры типа "случайная температура" на критическое поведение. Пусть $r(x) = \tau + V(x)$ (случайное поле локальной критической температуры), где $V(x)$ характеризует потенциал случайного поля дефектов в точке x со средним значением по распределению дефектов, равным нулю:

$$\langle\langle V(x) \rangle\rangle = 0. \quad (1.27)$$

Процедура усреднения функции свободной энергии и корреляционных функций по потенциалу примесей восстанавливает трансляционную инвариантность этих величин, что позволяет применить для дальнейшего исследования критического поведения стандартную ренормгрупповую технику.

Распределение дефектов обычно задается через второй момент функции распределения

$$\langle\langle V(x)V(y) \rangle\rangle = g(x - y). \quad (1.28)$$

В простейшем случае некоррелированных точечных дефектов [27]:

$$g(x - y) = v\delta^d(x - y), \quad (1.29)$$

где v пропорциональна концентрации дефектов; d - размерность системы. Существуют более сложные и реалистичные модели. Модель с протяженными дефектами размерности ε_d , которые параллельны друг другу и хаотически распределены по объему образца [28], описывается распределением с

$$g(x - y) = v\delta^{d-\varepsilon_d}(x_{\perp} - y_{\perp}). \quad (1.30)$$

Другая модель, предложенная Вейнрибом и Гальпериным [19], учитывает эффекты корреляции дефектов со случайной ориентацией и описывается распределением с

$$g(x - y) = |x - y|^{-a}, \quad (1.31)$$

где a - параметр корреляции. Асимптотическое поведение свободной энергии системы с дефектами как функции температуры может быть представлено в виде

$$\langle\langle F/kT \rangle\rangle = \tau^{2-\alpha}(A + B\tau^{-\varphi} + \dots), \quad (1.32)$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$; φ - критический индекс "кроссовера" характеризует влияние дефектов на критическое поведение системы. При $\varphi > 0$ это влияние существенно и приводит к критическому поведению с новыми критическими индексами, а при $\varphi < 0$ влияние дефектов несущественно и критическое поведение неупорядоченных систем будет характеризоваться критическими индексами систем без дефектов. Для точечных дефектов $\varphi = \alpha$. Таким образом, точечные дефекты существенны, если $\alpha > 0$. Это утверждение составляет суть *эвристического критерия Харриса* [29], согласно которому при отрицательном индексе теплоемкости ($\alpha < 0$) критическое поведение слабонеоднородной системы оказывается таким же, как у чистого вещества. Если же $\alpha > 0$, то при сохранении характера фазового перехода второго рода критические индексы отличаются по величине от индексов, измеряемых в случае чистого вещества.

Индексы зависят от числа компонент параметра порядка n следующим образом:

($n = 1$) - Изинговские магнетики $\alpha = 0.109(4)$ [30],

($n = 2$) - XY-магнетики $\alpha = -0.01278(24)$ [31],

($n = 3$) - Гейзенберговские магнетики $\alpha = -0.115(15)$ [32].

Точечные δ -коррелированные дефекты существенны только для критического поведения изингоподобных систем ($n = 1$).

В случае модели протяженных дефектов $\varphi = \alpha + \epsilon_d \nu$ [33], что приводит к новому критическому поведению. В рамках модели Вейнриба-Гальперина $\varphi = \alpha + (d - a)\nu = 2 - a\nu$ [19]. Протяженные дефекты и эффекты корреляции дефектов существенно сказываются на более широком классе систем, испытывающих фазовый переход второго рода. Таким образом, наличие дефектов небольшой концентрации не приводит к размыванию критической точки. При этом, как показывают дополнительные исследования, влияние беспорядка, вызванного присутствием дефектов, сильнее проявляется в динамике.

Экспериментальные исследования [34, 35] подтвердили численное отличие статических критических индексов для неупорядоченных систем от их значений для однородных систем и показали хорошее согласие с результатами теоретических расчетов.

1.3 Основные методы и алгоритмы для моделирования неупорядоченных систем.

1.3.1 Метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса.

Метод Монте-Карло - это метод статистического моделирования систем со многими степенями свободы. В основе его лежит использование случайных чисел для машинной имитации вероятностных распределений [36–39]. Метода Монте-Карло применяется как для определения различных характеристик системы в рамках классических спиновых моделей [39], так и для исследования систем в рамках квантовой теории [40].

Стоит отметить, что качество результатов моделирования зависит от качества используемого генератора случайных чисел [41–43]. Рассмотрим применение метода Монте-Карло к моделированию поведения системы спинов в рамках модели Изинга. Промоделируем систему из N частиц, находящихся в объеме V при постоянной температуре T . Поскольку мы можем генерировать только ограниченное число m из полного, в общем случае огромного, числа M конфигураций, то можно получить оценку среднего значения $\langle A \rangle$ из выражений:

$$\langle A \rangle = \left(\frac{1}{Z} \right) \sum_{n=1}^M A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \cong \frac{\sum_{n=1}^m A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}, \quad (1.33)$$

где E_n и A_n обозначают полную энергию и значение величины A в конфигурации n . Напрашивается простейшая процедура Монте-Карло, состоящая в том, что генерируется случайная конфигурация, вычисляются E_n , A_n и произведение $A_n \exp(-E_n/kT)$, подсчитывается соответствующий вклад этой конфигурации в суммы выражения для $\langle A \rangle$. Однако многие из этих конфигураций маловероятны и дают малый вклад в сумму при равновероятной выборке конфигураций. Поэтому необходимо пользоваться методом существенной выборки, повышающей статистический вес каждой конфигурации, и генерировать конфигурации в соответствии с функцией распределения вероятностей P_n . Использование существенной выборки приводит к уменьшению статистической погрешности без увеличения числа конфигураций. Тогда процедура нахождения среднего аппроксимируется выражением:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^m \left(\frac{A_n}{P_n} \right) \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \left(\frac{1}{P_n} \right) \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}. \quad (1.34)$$

Самый простой и естественный способ выбора P_n состоит в использовании самого канонического распределения [37]

$$P_n = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}, \quad (1.35)$$

при котором среднее $\langle A \rangle$ превращается в среднее арифметическое:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m A_n. \quad (1.36)$$

Выбор P_n в таком виде предложен Метрополисом [44]. Ниже приведена наиболее общая форма алгоритма Метрополиса на примере системы спинов.

1. Формируем начальную (равновесную) конфигурацию.
2. Производим случайное пробное изменение в начальной конфигурации, т.е. случайным образом выбираем какой-нибудь спин и пробуем его опрокинуть.
3. Вычисляем ΔE , т.е. изменение энергии системы, обусловленное произведенным пробным изменением конфигурации.
4. Если $\Delta E \leq 0$, то принимаем новую конфигурацию и переходим к шагу 8.
5. Если $\Delta E > 0$, то вычисляем вероятность перехода $W = \exp(-\Delta E/kT)$.
6. Генерируем случайное число r в интервале $(0,1)$
7. Если $r \leq W$, то новую конфигурацию принимаем, в противном случае сохраняем предыдущую конфигурацию.
8. Определяем значения требуемых физических величин.
9. Повторяем шаги 2 - 8 для получения достаточного числа конфигураций.

10. Вычисляем средние по конфигурациям, которые статистически независимы.

В основе алгоритма Метрополиса лежит использование равновесной функции канонического распределения P_n , и, следовательно, при применении этого алгоритма должны выбираться термодинамически равновесные состояния системы. Однако у нас нет уверенности, что сформированная начальная конфигурация является равновесной. Чтобы избежать этой проблемы, необходимо, начиная с произвольной конфигурации спинов, например, все спины направлены вверх, процедуру вычисления среднего проводить только после достижения системой равновесного состояния, т.е. после выполнения такого числа шагов Монте-Карло на спин (MCS/s), когда на основании исследования релаксационных свойств системы ее можно считать достигшей равновесия.

Последовательность состояний, задаваемых в алгоритме Метрополиса вероятностью перехода между ближайшими конфигурациями, образует марковский процесс. Можно связать шкалу времени t со шкалой n последовательных конфигураций, считая, что N случайных выборок узлов системы осуществляется за единицу времени. Данная единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин.

Тогда эволюция неравновесной функции распределения $P_n(t)$ может быть записана в виде основного уравнения (кинетического уравнения Глаубера):

$$\frac{dP_n}{dt} = - \sum_{n'} W(n \rightarrow n') P_n(t) + \sum_{n'} W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t), \quad (1.37)$$

где первая сумма описывает изменение вероятности обнаружения n -конфигурации за счет переходов из n -состояния в другие, а вторая сумма – за счет переходов из всех других состояний в n -ое. Для того чтобы марковский процесс обладал нужным свойством сходимости $P_n(t)$ к $P_n = (1/Z) \exp(-E_n/kT)$ при временах, больших времени релаксации, достаточно потребовать выполнения условия детального баланса

$$W(n \rightarrow n') P_n(t) = \sum_{n'} W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t). \quad (1.38)$$

Это означает, что отношение вероятностей перехода зависит только от изменения энергии

$$\frac{W(n \rightarrow n')}{W(n' \rightarrow n)} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{nm}}{kT}\right). \quad (1.39)$$

Данное соотношение не определяет, конечно, функцию $W(n \rightarrow n')$ однозначно. Обычно W выбирают или как в алгоритме Метрополиса

$$W(n \rightarrow n') = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta E_{nm}}{kT}\right), & \text{при } \Delta E_{nm} > 0, \\ 1, & \text{при } \Delta E_{nm} \leq 0. \end{cases} \quad (1.40)$$

или в виде функции Глаубера

$$W(n \rightarrow n') = \frac{1}{2} \left[1 - \text{th} \left(-\frac{\Delta E_{nm}}{2kT} \right) \right]. \quad (1.41)$$

В качестве определения среднего наблюдаемой величины A , не зависящей от времени явно, выступает соотношение

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n A_n P_n(t). \quad (1.42)$$

Оно задает динамическую эволюцию величины A посредством временной зависимости $P_n(t)$ – решения уравнения Глаубера. Однако строго показывается, что данная процедура усреднения эквивалентна усреднению по начальному состоянию $P_n(t_0)$, в то время как состояние n , а следовательно, и A изменяются со временем в соответствии с марковским процессом, задаваемым $W(n \rightarrow n')$. При этом

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n P_n(t_0) A_n(t), \quad (1.43)$$

что дает процедуру усреднения по последовательности конфигураций в стохастическом марковском процессе.

1.3.2 Кластерные алгоритмы.

Стандартный алгоритм Метрополиса, основанный на перевороте одного спина, совершает маленькие шаги в конфигурационном пространстве. Состояния оказываются сильно коррелированными между собой (т.е. новое состояние системы сильно зависит от предыдущего и приходится делать большое количество Монте-Карло шагов, чтобы система «забыла» свое состояние).

Система долго переходит в состояние равновесия. Это особенно сильно проявляется на больших решетках и вблизи критической точки. Кластерные алгоритмы основаны на перевороте кластеров, содержащих много спинов, система совершает большие скачки в фазовом пространстве (соседние состояния в марковской цепи становятся слабо коррелированными) и время релаксации системы значительно уменьшается.

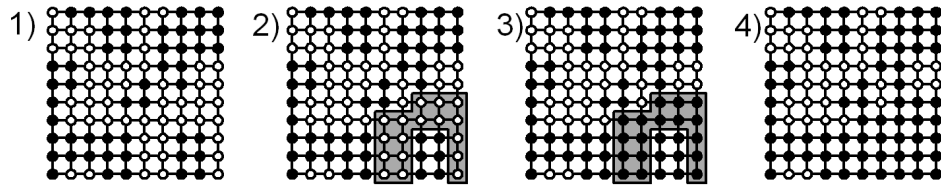
Многокластерный алгоритм был предложен Свендсенем и Вангом [45] с целью уменьшения влияния эффектов критического замедления времени релаксации системы на результаты моделирования:

1. Выбирается случайный единичный вектор \vec{r} .
2. Просматриваются все nn -состояния \vec{S}_i, \vec{S}_j . Если \vec{S}_i и \vec{S}_j сонаправлены (лежат по одну сторону от плоскости перпендикулярной направлению \vec{r} , т.е. если $(\vec{S}_1\vec{r})(\vec{S}_2\vec{r}) > 0$), то создается связь между этими узлами с вероятностью $1 - \exp\left(\frac{-2J(\vec{S}_1\vec{r})(\vec{S}_2\vec{r})}{T}\right)$.
3. Создаются кластеры: набор узлов соединенных связями.
4. Каждый кластер переворачивается с вероятностью $1/2$. Т.е. каждый спин в кластере меняет свое значение следующим образом $\vec{S}_i = \vec{S}_i - 2(\vec{S}_i\vec{r})\vec{r}$

Другой вариант однокластерного алгоритма был предложен Вольфом [46]:

1. Выбирается случайный единичный вектор \vec{r}
2. Выбирается случайным образом спин в решетке \vec{S}_1 (центральный). Выбранный спин зеркально отражается в плоскости перпендикулярной направлению \vec{r} ; $\vec{S}_i = \vec{S}_i - 2(\vec{S}_i\vec{r})\vec{r}$

Алгоритм Вольфа



Алгоритм Свендсена-Ванга

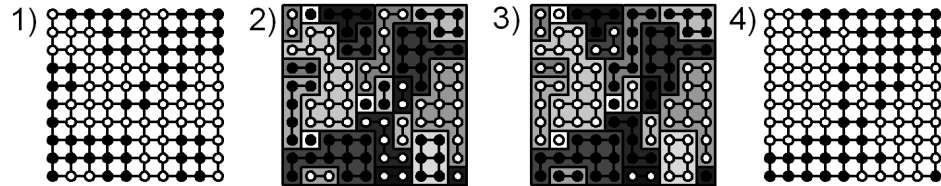


Рис. 1.1: Примеры выращивания кластера однокластерным алгоритмом Вольфа и многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга для двумерной модели Изинга: \bullet – спин направлен вверх, \circ – спин направлен вниз.

3. Рассматриваются ближайшие "соседи" центрального спина. Спин считается сонаправленным, если он лежит по одну сторону от плоскости перпендикулярной направлению \vec{r} с вектором \vec{S}_1 т.е. если $(\vec{S}_1 \vec{r})(\vec{S}_2 \vec{r}) > 0$.
4. Такой спин переворачивается (а его координаты запоминаются в стеке) с вероятностью $1 - \exp\left(\frac{-2(\vec{S}_1 \vec{r})(\vec{S}_2 \vec{r})}{T}\right)$.
5. После проверки всех соседних узлов, спин, координата которого были загружены в стек последними, выбирается центральным и снова выполняется пункт 3.
6. Процедура переворота спинов заканчивается тогда, когда стек становится пустым. Этот процесс называется переворотом кластера, а все перевёрнутые спины считаются принадлежащими кластеру Вольфа.

Отличие этих алгоритмов заключается в том, что в случае однокластерного алгоритма Вольфа строится кластер, который переворачивается с вероятностью равной 1, а в случае многокластерного алгоритма Свендсена-Ванга система разбивается на множество кластеров, каждый из которых переворачивается с вероятностью 1/2. На рисунке 1.1 пред-

ставлены примеры выращивания кластера однокластерным алгоритмом Вольфа и многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга для однородной двумерной модели Изинга.

1.3.3 Модификация метода Монте-Карло для неупорядоченных систем.

При создании спиновой конфигурации со случайно распределенными примесями в решетке возникают несвязанные геометрические кластеры магнитных узлов. При концентрации спинов p больших порога спиновой перколяции p_c практически всегда существует спиновой кластер, протекающий с грани на грань и какое-то количество изолированных кластеров, содержащих относительно небольшое число спинов. В пределе бесконечно большого размера вклад в магнитные характеристики системы будут давать только скоррелированные спины бесконечно перколяционного кластера, поэтому будет разумным при вычислении критических характеристик не учитывать вклад от узлов, не имеющих связи с перколяционным кластером. Такая процедура позволяет уменьшить "шум" от спинов кластеров конечного размера. Для распределения спинов с заданной концентрацией p по узлам решетки удобно использовать алгоритм выращивания перколяционного кластера Хаммерсли-Лиса-Александровица [37].

Практически детали реализации 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.

Метод Монте-Карло при процедуре моделирования поведения неупорядоченных систем претерпевает ряд изменений. Атомам примеси при

моделировании сопоставляются пустые узлы. Спин соответствующего пустого узла полагается равным нулю. Алгоритм Метрополиса при этом сохраняется, как и для однородных систем с учетом того, что вклад в энергию взаимодействия магнитного атома со спином $S \neq 0$ с немагнитным атомом со спином $S = 0$ оказывается равным нулю.

Следует отметить, что для каждой выращенной на решетке примесной конфигурации реализуется алгоритм Метрополиса получения различных термодинамических характеристик системы спинов как величин усредненных по числу шагов Монте-Карло. Однако искомая термодинамическая характеристика неупорядоченной системы получается лишь после дополнительного усреднения получаемых величин для отдельных конфигураций по полному набору выращенных различных примесных конфигураций. При этом значения термодинамических характеристик будут более достоверными с увеличением числа примесных конфигураций, используемых при усреднении.

1.3.4 Процедура линейной аппроксимации и оценка погрешности измерений.

При анализе данных использовалась схема линейной аппроксимации с использованием метода наименьших квадратов

$$\hat{y}_i = a + bx_i, \quad (1.44)$$

$$b = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{x^2 - (\bar{x})^2}, \quad (1.45)$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}. \quad (1.46)$$

Для оценки погрешности нахождения коэффициентов использовались следующие формулы:

$$m_b = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 2} \cdot \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2}}, \quad (1.47)$$

$$m_a = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - 2} \cdot \frac{\sum x_i^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}}, \quad (1.48)$$

где n - число измерений,

$$\Delta b_{appr} = m_b \cdot t_{\alpha,k}, \quad (1.49)$$

$$\Delta a_{appr} = m_a \cdot t_{\alpha,k}, \quad (1.50)$$

где $t_{\alpha,k}$ - коэффициент Стьюдента, $\alpha = 1 - \gamma$ - уровень значимости, γ - доверительный интервал, $k = n - 2$ - число степеней свободы.

Для оценки погрешности прямого измерения использовалась следующая формула:

$$\Delta b = \frac{1}{m-2} \cdot \sum (b_j - \bar{b})^2 + \Delta b_{appr}, \quad (1.51)$$

где m - кол-во групп, b_j - значение величины в j -той группе.

Оценка погрешности косвенного измерения вычислялась следующим образом:

$$\Delta f = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial b_1} \Delta b_1\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b_2} \Delta b_2\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial b_k} \Delta b_k\right)^2}, \quad (1.52)$$

где $\partial f / \partial b_j$ - частная производная функции f , вычисленная при значении переменных, соответствующих средним значениям $\bar{b}_1, \bar{b}_2 \dots \bar{b}_k$

Глава 2

Численное исследование слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с дальнодействующей корреляцией дефектов с учетом различных начальных состояний.

2.1 Введение

Наличие дефектов структуры приводит к смене динамики изотропного магнетика, описываемой моделью J , на релаксационную динамику модели A по классификации Гальперина-Хоенберга [47]. Алгоритм Метрополиса с динамикой опрокидывания спина является разумным приближением к реальной динамике магнетика, соответствующей релаксационной модели A . Однако, согласно критерию Харриса критическое поведение модели Гейзенберга устойчиво относительно влияния точечного

некоррелированного структурного беспорядка. В этом плане, становится очень важным исследование влияния протяженных примесных структур на критическое поведение характеристик модели Гейзенберга.

Традиционное моделирование критического поведения системы взаимодействующих частиц методом Монте-Карло наталкивается на трудности, связанные в основном с явлением критического замедления, характеризующимся тем, что время релаксации системы, как и время корреляции состояний, неограниченно растет по мере приближения к критической температуре и степенной характер их асимптотической зависимости от приведенной температуры определяется критическим индексом z . И определяется выражением

$$\tau_{\text{corr}}, \tau_{\text{rel}} \sim |T_c - T|^{-z\nu}. \quad (2.1)$$

Для чистых систем в работах [48, 49] было проведено численное исследование методами Монте-Карло критической динамики трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. В работе [48] получено значение динамического критического индекса $z = 2.62$, а в [49] – $z = 2.35(2)$ в предположении его независимости от концентрации дефектов начиная от уровня слабого разбавления и вплоть до порога спиновой перколяции. Однако полученное значение критического показателя системы плохо согласуется с экспериментальным значением $z = 2.18(10)$, полученным в работе [50] для слабо разбавленного изингоподобного магнетика $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$. В работе [51] было осуществлено теоретико-полевоое описание критической эволюции трехмерной чистой и структурно неупорядоченной модели Изинга и получены значения $z = 2.024(6)$ (чистая система) и $z = 2.1792(13)$ (слабо неупорядоченная система), соответственно, в четырехпетлевом и шестипетлевом приближениях с применением к рядам теории различных методов суммирования, хорошо согласующиеся в рамках погрешностей с результатами экспериментального исследования.

Для структурно неупорядоченных систем и систем с многокомпонентным параметром порядка эта проблема еще более существенна, так как их неравновесное критическое поведение определяется индексом z , принимающим большие значения, чем для однородных систем.

Для уменьшения эффектов влияния критического замедления применяют кластерные алгоритмы Вольфа или Сведсена-Ванга, но эти алгоритмы столь существенно меняют динамику системы по сравнению с алгоритмом Метрополиса, что для получения информации о характеристиках критической динамики их применять нельзя.

Для описания влияния неравновесных начальных условий на критическую динамику в работе [52] в рамках ренормгруппового подхода был разработан метод коротковременной динамики (МКД). Который позволяет получать значения не только динамических, но и статических критических индексов. Данный метод был апробирован многочисленными исследованиями [53–59, 78, 79], показавшими, что результаты МКД для статических критических индексов находятся в хорошем согласии с традиционными методами Монте-Карло по изучению равновесных свойств и с теоретическими методами. Особенностью МКД является то, что информация об универсальном критическом поведении может быть получена на относительно малых макроскопических промежутках времени (до 2000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s)) на ранней стадии развития системы в критической точке или ее окрестности.

В соответствии с теорией скейлинга сингулярная часть потенциала Гиббса $\Phi_{\text{sing}}(t, \tau, h, m_0)$, определяющая состояние системы в критической области, характеризуется обобщенной однородностью относительно основных термодинамических переменных

$$\Phi_{\text{sing}}(t, \tau, h, m_0) = b\Phi_{\text{sing}}(b^{a_t}t, b^{a_\tau}\tau, b^{a_h}h, b^{a_m}m_0), \quad (2.2)$$

времени t , приведенной температуры $\tau = (T - T_c)/T_c$, поля h и начальной намагниченности m_0 , здесь b - фактор подобия, a_i - показатели подобия. Как следствие этого, в критической точке ($\tau = 0, h = 0$) намагниченность $m = -\delta\Phi/\delta h$ характеризуется следующей временной зависимостью

$$m(t, m_0) = t^{-(a_h+1)/a_t} F_m(m_0 t^{-a_m/a_t}). \quad (2.3)$$

После микроскопически малого времени t_{mic} для k -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} m^{(k)}(t/b^z, b^{1/\nu}\tau, L/b, b^{x_0}m_0), \quad (2.4)$$

где t – время, $\tau = (T - T_c)/T_c$ – приведенная температура, где L – линейный размер решетки, m_0 – начальное значение намагниченности, b – произвольный масштабный фактор, β , ν , z – критические индексы, x_0 – показатель масштабной размерности начальной намагниченности.

Разложение правой части в (2.3) по малой величине $m_0 t^{-a_m/a_t}$ приводит к степенной зависимости

$$m(t) \sim t^{-(a_h+a_m+1)/a_t} \sim t^{\theta'}, \quad (2.5)$$

где a_m определяет поведение системы за счет влияния неравновесных начальных состояний.

Начальное состояние системы выбирается обычно либо с $m_0 \ll 1$, либо с $m_0 = 1$. Исследования показывают, что динамический процесс, начинающийся с полностью упорядоченного состояния ($m_0 = 1$), более предпочтителен из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты. Более того, в этом случае не возникает зависимости от нового критического индекса θ' . В работе [52] на основе ренормгруппового анализа было показано, что если начальное состояние ферромагнитной системы характеризуется достаточно высокой степенью хаотизации спиновых переменных со значением относительной намагниченности, далеким от состояния насыщения ($m_0 \ll 1$), то в критической точке процесс релаксации системы из данного начального неравновесного состояния на макроскопически малых временах будет характеризоваться не уменьшением, а увеличением намагниченности со временем по степенному закону с показателем θ' (рис. 2.1а):

$$m(t) \sim t^{\theta'}. \quad (2.6)$$

При этом, с увеличением времени коротковременная динамика параметра порядка при $t \gg t_{\text{cr}} \sim m_0^{-1/(\theta'+\beta/z\nu)}$ сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону $m(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$ (рис. 2.1б) с показателем, опреде-

ляемым статическими критическими индексами β и ν и динамическим критическим индексом z .

Наряду с этим в [52] предсказывается двухвременная зависимость для функции отклика $R(t, t_w)$ и корреляционной функции $A(t, t_w)$, которая в коротковременном режиме ($t/t_w \ll 1$) принимает вид степенной зависимости от отношения переменных t/t_w (t_w – время ожидания), характеризуемой показателем θ :

$$\begin{aligned} R(t, t_w) &\sim (t/t_w)^\theta (t - t_w)^{\varkappa - d/z} \mathcal{F}_R(t_w/t), \\ A(t, t_w) &\sim (t/t_w)^{\theta-1} (t - t_w)^{\varkappa + 1 - d/z} \mathcal{F}_A(t_w/t), \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\varkappa = (2 - z - \eta)/z$. Критический индекс θ' и θ связаны скейлинговым соотношением $\theta' = \theta + \varkappa$, поэтому независимым индексом является только один из них (θ или θ').

Метод коротковременной динамики позволяет получить информацию о критическом поведении системы уже на начальном неравновесном динамическом этапе не достигая состояния равновесия и данный метод был успешно применен для расчета характеристик различных систем [60, 61].

Для начального состояния системы с $m_0 = 1$ (спины ориентированы в одном направлении) и для решеток с достаточно большими линейными размерами L уравнение для намагниченности ($k = 1$) при выборе фактора $b = t^{1/z}$ принимает следующий вид:

$$m(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} m\left(1, t^{1/\nu z} \tau\right) \sim t^{-\beta/\nu z} \left(1 + A_m t^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2)\right). \quad (2.8)$$

В пределе $\tau \rightarrow 0$

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (2.9)$$

Для неупорядоченных систем вычисление $m^{(k)}(t)$ осуществляется в следующем виде

$$m^{(k)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \left| \sum_{i=1}^{N_s} p_i \vec{S}_i \right| \right)^k \right\rangle \right], \quad (2.10)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям, а квадратные скобки – усреднение по различным ре-

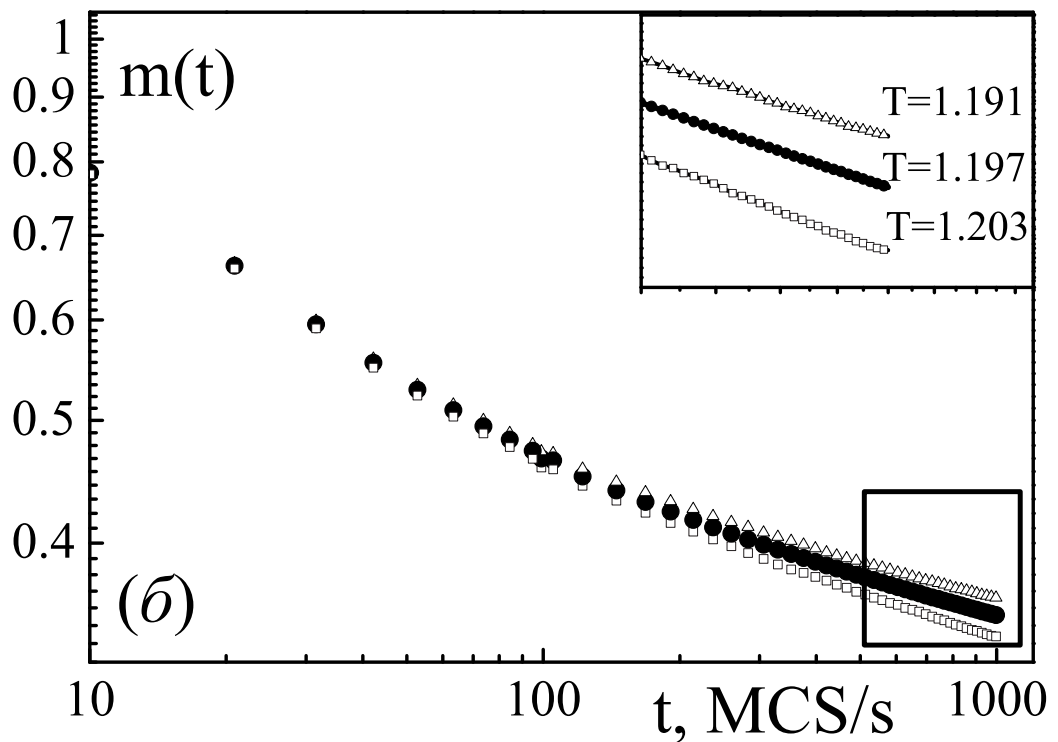
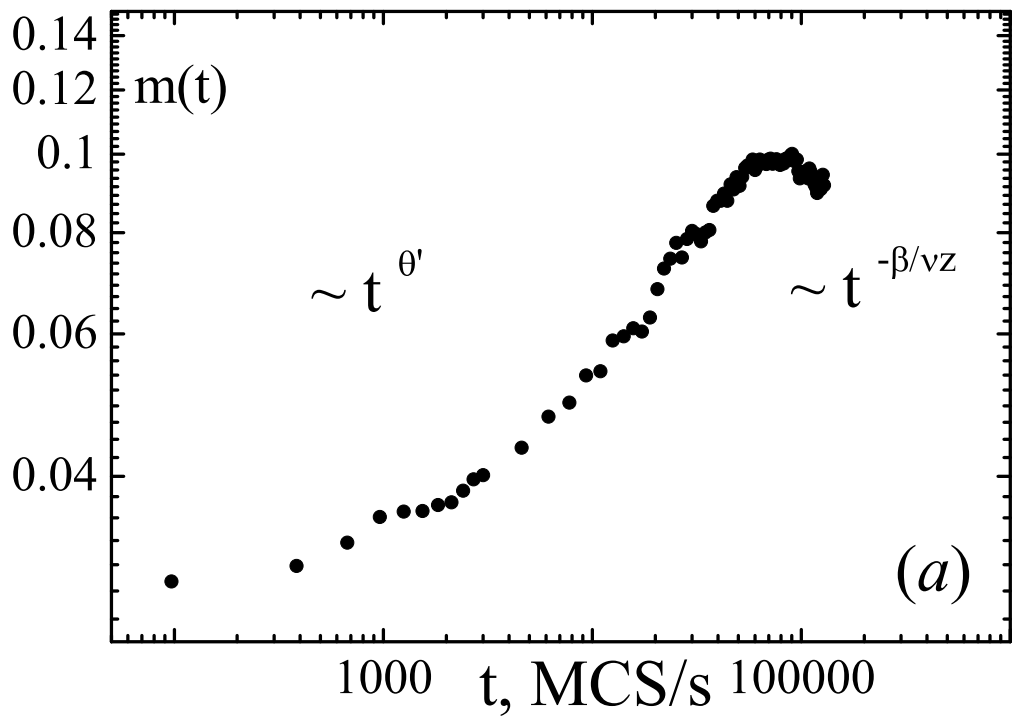


Рис. 2.1: Релаксация намагниченности из различных начальных состояний $m_0 \ll 1$ (a) и $m_0 = 1$ (b)

лизациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации p , $N_s = pL^3$.

2.2 Описание модели

Рассматривается модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с линейным размером L и наложенными периодическими граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Гейзенберга записывается в виде

$$H = -J \sum_{i,j}^{N_s} p_i p_j \vec{S}_i(t) \vec{S}_j(t), \quad (2.11)$$

где $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – это трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ($p_i = 1$, когда узел i занят спином, и $p_i = 0$, когда узел занят не магнитным атомом). Общая спиновая концентрация в системе $p = 0.80$. Числа заполнения p_i принимают значения 0 и 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(1 - p_i) \quad (2.12)$$

В данной работе исследуется модель Вейнриба-Гальперина с так называемой дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов [19], когда парная корреляционная функция $g(x - y)$ спадает с расстоянием по степенному закону с $g(x - y) \sim |x - y|^{-a}$, где a - параметр корреляции дефектов структуры. Критическое поведение неупорядоченной системы с точечными некоррелированными дефектами структуры может быть описано моделью Вейнриба-Гальперина с параметром корреляции $a = 3$. При наличии в системе протяженных дефектов – дислокаций или плоскостей, ориентированных случайным образом, ее критическое поведение может быть также описано в рамках модели Вейнриба-Гальперина при значениях параметра корреляции $a = d - 1$ или $a = d - 2$, соответственно, где d - размерность системы. При значениях параметра корреляции

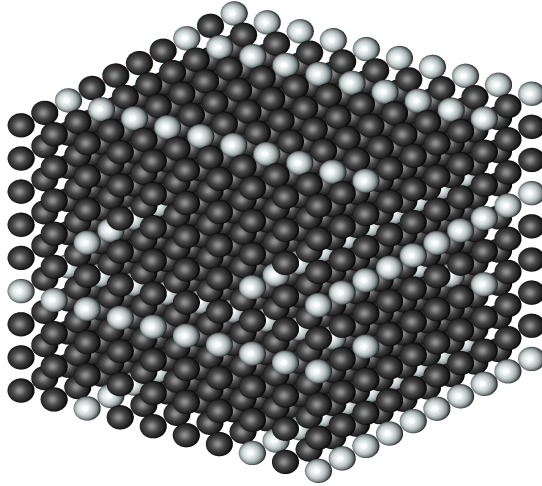


Рис. 2.2: Распределение дефектов с дальнедействующей корреляцией в кубической решетке

$2 < a < 3$ модель Вейнриба-Гальперина описывает фрактальные примесные структуры. Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем $a = 2$. Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым (рис. 2.2). Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым. Физическим основанием для этого условия служит то, что в реальных материалах дислокации как линейные дефекты равномерно распределены по макроскопическому образцу с вероятностью их пересечения близкой к нулю.

2.3 Определение критической температуры слабо неупорядоченной модели Гейзенберга

Для определения критической температуры было осуществлено компьютерное моделирование системы в состоянии равновесия при различных температурах. Для снижения влияния эффектов критического замедления и корреляции различных спиновых конфигураций был применен однокластерный алгоритм Вольфа. Для уменьшения корреляций спиновых конфигураций, вычисление намагниченности и других термодинамических величин осуществляется через несколько переворотов кластера Вольфа. За один шаг Монте-Карло на спин (MCS/s) принималось 5 переворотов кластера Вольфа. Было использовано 256 MCS/s для достижения состояния равновесия и 2048 MCS/s для статистического усреднения по спиновым конфигурациям.

Анализировались зависимости кумулянта Биндера 4-го порядка $U_4(T, L)$ от температуры

$$U_4(T, L) = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle m^{(4)} \rangle]}{([\langle m^{(2)} \rangle])^2} \right), \quad (2.13)$$

Кумулянт $U_4(L, T)$ имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму

$$U_4(L, T) = u(L^{\frac{1}{\nu}}(T - T_c)). \quad (2.14)$$

Кумулянт определен так, что $0 \leq U_4 \leq 1$. При этом для температур выше критической $U_4(L, T) \rightarrow 0$ в пределе $L \rightarrow \infty$. Данная скейлинговая зависимость кумулянта позволяет определять критическую температуру $T_c(L = \infty)$ для бесконечной системы через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость $U_4(L, T)$ для различных L . В критической области при $T \rightarrow T_c$

$$\frac{dU}{dT} = aL^{\frac{1}{\nu}} \quad (2.15)$$

и, следовательно, по максимальному наклону кумулянтов вблизи точки их пересечения при $L \rightarrow \infty$ можно определить значение критического индекса ν , характеризующего температурную расходимость корреляционной длины при $T \rightarrow T_c$. В случае фазовых переходов второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов имеют ярко выраженную зависимость от L и некоторую область (треугольник) пересечения, близкую к точке. Также применялась методика пересечения кривых ξ/L для определения критической температуры T_c [63]. Рассчитываются кривые температурной зависимости для ξ/L для решеток с такими же размерами. Координаты точек пересечения кривых позволяют определить критическую температуру. Расчет корреляционной длины ξ_L и восприимчивости χ_L осуществляется в соответствии со следующими соотношениями [64]:

$$\xi = \frac{1}{2 \sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\chi_L}{\Phi} - 1}, \quad (2.16)$$

$$\chi_L = \overline{m^{(2)}}/pL^3, \quad (2.17)$$

$$m^{(2)} = \sum_j p_j S_j^{x2} + \sum_j p_j S_j^{y2} + \sum_j p_j S_j^{z2}, \quad (2.18)$$

где Φ определяется через Фурье-образ намагниченности [65]

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} p_{\vec{r}} S_{\vec{r}}, \quad (2.19)$$

как

$$\Phi = \frac{V}{3} \overline{(|G(2\pi/L, 0, 0)|^2 + |G(0, 2\pi/L, 0)|^2 + |G(0, 0, 2\pi/L)|^2)}, \quad (2.20)$$

Иначе можно представить в виде

$$F_{Sx} = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_j p_j S_j^x \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,j}}{L}\right) \right|^2, \quad (2.21)$$

$$F_{Sy} = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_j p_j S_j^y \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,j}}{L}\right) \right|^2, \quad (2.22)$$

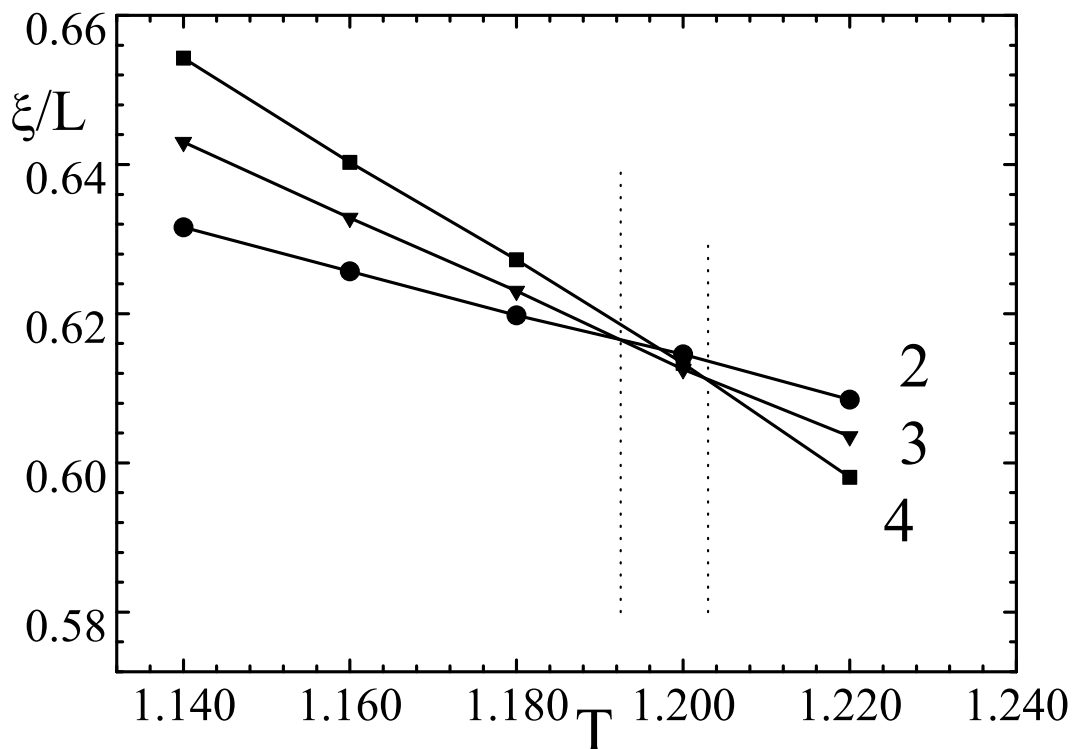
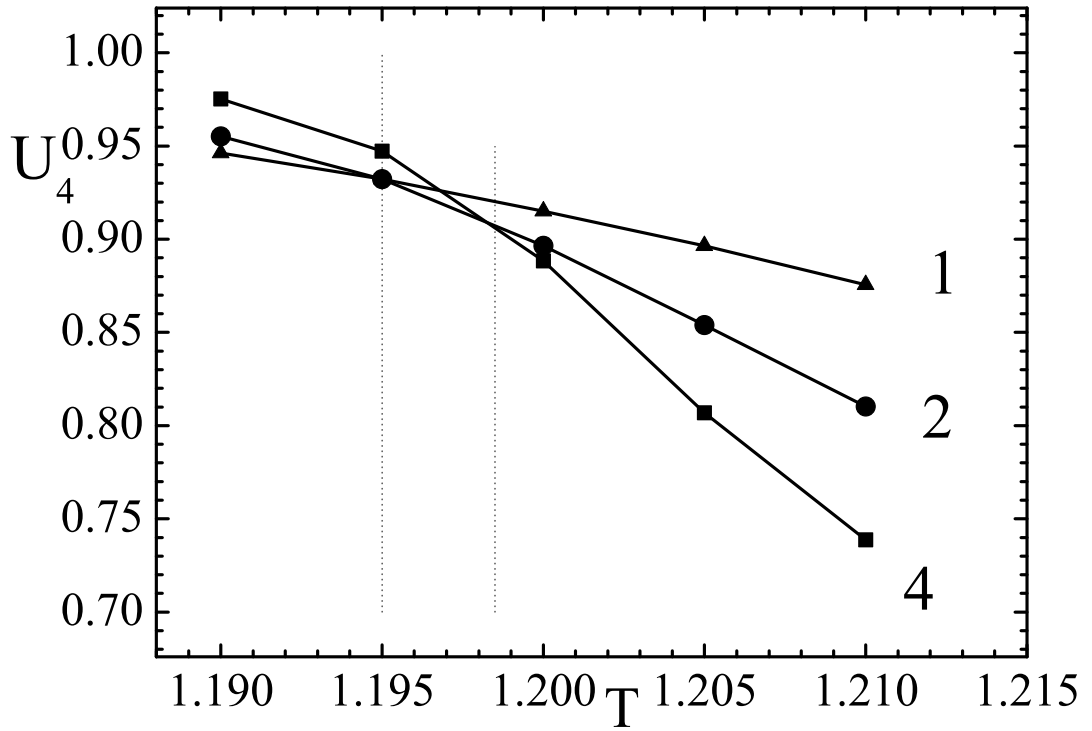


Рис. 2.3: Температурная зависимость кумулянта Биндера U_4 и отношения ξ/L для различных линейных размеров решетки $L = 32$ (1), 64 (2), 96 (3), 128 (4)

$$F_{S_z} = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_j p_j S_j^z \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,j}}{L}\right) \right|^2, \quad (2.23)$$

$$F = F_{S_x} + F_{S_y} + F_{S_z}, \quad (2.24)$$

$$\Phi = \overline{\langle F \rangle} / pL^3, \quad (2.25)$$

где $(x_{1,j}, x_{2,j}, x_{3,j})$ - координаты j -ого узла решетки, $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта сверху - усреднение различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации.

По точкам пересечения графиков данных величин для различных размеров решетки (рис. 2.3) была определена критическая температура $T_c = 1.197(2)$, где температура измеряется в единицах обменного интеграла. Данные кривые были получены усреднением по 2300 различным конфигурациям примеси.

2.4 Релаксация из полностью упорядоченного начального состояния с $m_0 = 1$

При найденной критической температуре $T_c = 1.197$ было осуществлено численное исследование неравновесной критической динамики в коротковременном режиме для трехмерной слабо неупорядоченной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией $p = 0.80$ с линейными дефектами. Было осуществлено моделирование критической релаксации системы из полностью упорядоченного начального состояния с начальной намагниченностью $m_0 = 1$.

В данной работе осуществлялось моделирование кубических решеток с размером $L = 128$. Для неупорядоченных систем намагниченность вычисляется по формуле

$$m(t) = \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \left((\sum_i^{N_s} p_i S_i^x)^2 + (\sum_i^{N_s} p_i S_i^y)^2 + (\sum_i^{N_s} p_i S_i^z)^2 \right)^{1/2} \right\rangle \right], \quad (2.26)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям, а квадратные скобки - усреднение по различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации p , $N_s = pL^3$.

Показатель $1/\nu z$ может быть определен, если продифференцировать $\ln m(t, \tau)$ по приведенной температуре τ

$$\partial_\tau \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}. \quad (2.27)$$

Для независимого определения динамического критического индекса z производился расчет кумулянта F_2 [62], с использованием средних при моделировании из различных начальных состояний

$$F_2(t, L) = \frac{m^{(2)}(t, L)|_{m_0=0}}{(m(t, L))^2|_{m_0=1}} \frac{t^{(d-2\beta/\nu)/z}}{t^{-2\beta/\nu z}} = t^{d/z}. \quad (2.28)$$

Временное поведение намагниченности $m(t)$ и кумулянта $F_2(t)$ исследовалось на временах до 1000 MCS/s. С целью численного определения логарифмической производной намагниченности проводился расчет намагниченности для двух близких к T_c температур, т. е. для $T + \Delta T = 1.200$ и $T - \Delta T = 1.194$. Для расчета логарифмической производной намагниченности использовалось следующее выражение

$$\partial_\tau \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} = \frac{1}{m(t, 0)} \cdot \left| \frac{m(t, \tau_1) - m(t, \tau_2)}{\tau_1 - \tau_2} \right|, \quad (2.29)$$

где $\tau_1 = (1.194 - T_c)/T_c$, $\tau_2 = (1.200 - T_c)/T_c$.

На рис. 2.1 приведены итоговые зависимости намагниченности $m(t)$ и на рис. 2.4 приведены итоговые зависимости кумулянта $F_2(t)$ и логарифмической производной намагниченности от времени в двойном логарифмическом масштабе. В работе проводилось усреднение вычисляемых величин по 4000 различным примесным конфигурациям. Все расчеты проводились на суперкомпьютерной вычислительной системе НИВЦ МГУ с использованием методов параллельного программирования.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применен алгоритм Метрополиса. Алгоритм Метрополиса, реализующий ди-

намику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели A и позволяет провести сравнение получаемого в результате моделирования критической релаксации системы динамического критического индекса z с результатами теоретико-полевого описания [20] критической динамики модели A для трехмерных систем с дальнедействующей пространственной корреляцией дефектов структуры.

Анализ кумулянта $F_2(t)$ показал, что на начальном этапе релаксации, временном интервале [15, 35] MCS/s степенному характеру зависимости $F_2(t)$ соответствует значение динамического индекса $z \approx 2.049$, соответствующее критическому поведению однородной модели Гейзенберга, а влияние линейных дефектов начинает проявляться лишь на временах $t > 80$ MCS/s. Значения показателей $\beta/\nu z$, $1/\nu z$, d/z были получены на интервале [80, 300] который соответствует минимуму среднеквадратичной погрешности аппроксимации (рис. 2.5).

Был осуществлен учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем, т. к. только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе $L \rightarrow \infty$. Для этого было использовано следующее выражение для временной зависимости наблюдаемых величин $X(t)$:

$$X(t) \sim t^\delta (1 + A_x t^{-\omega/z}), \quad (2.30)$$

где A_x – неуниверсальные амплитуды, ω – критический индекс поправки к скейлингу, а показатель $\delta = -\beta/\nu z$ в случае $X \equiv m(t)$, $\delta = d/z$ в случае $X \equiv F_2(t)$ и $\delta = 1/\nu z$ в случае $X \equiv \partial_\tau \ln m(t)$.

При анализе полученных кривых была использована схема линейной аппроксимации для зависимости $(Xt^{-\delta})$ от $t^{-\omega/z}$ при изменении значений показателя δ , а также критического индекса ω/z . Процедура расчета критического индекса ω заключалась в следующем:

1. Временной интервал влияния дефектов структуры был разбит на всевозможные участки Δt с длинами от 10 MCS/s до 900 MCS/s.

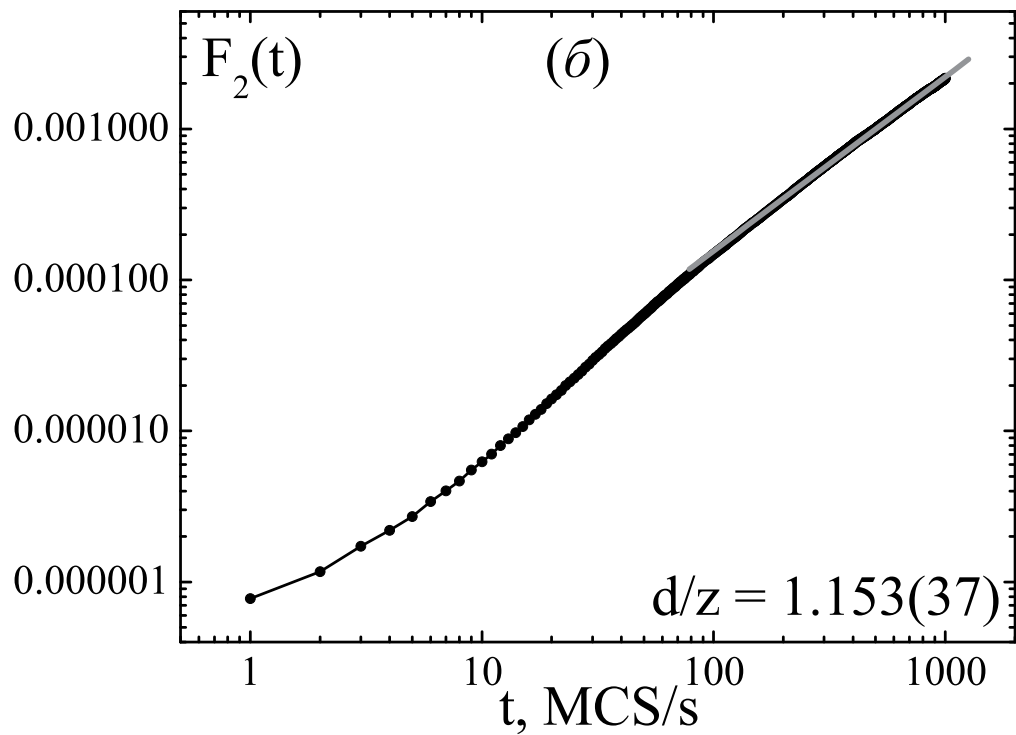
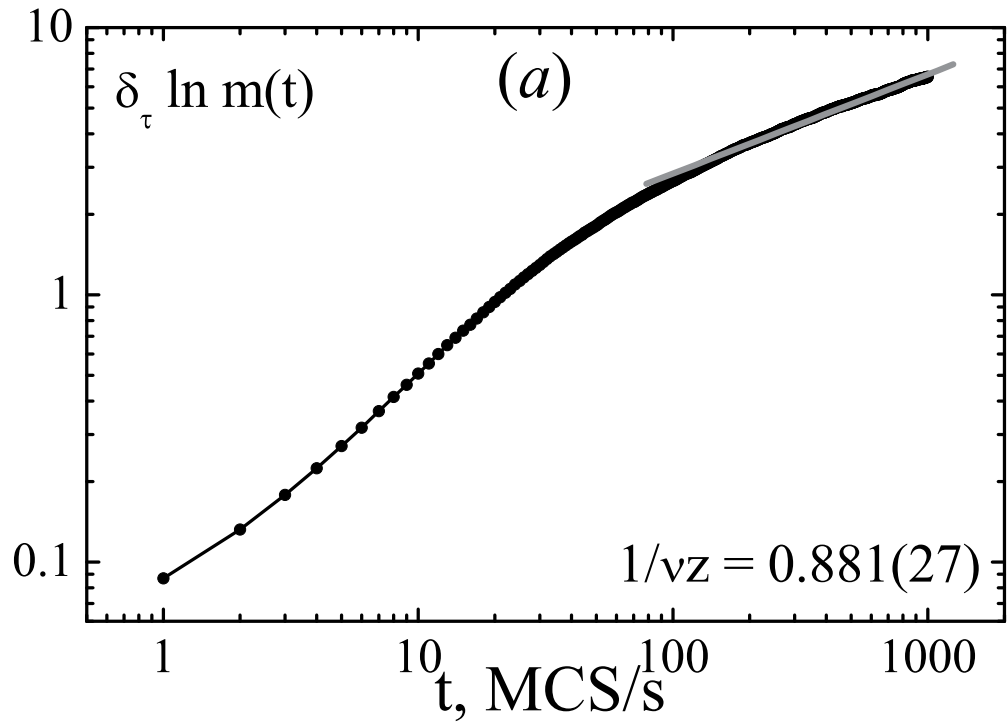


Рис. 2.4: Усредненные значения логарифмической производной намагниченности $\partial_\tau \ln m(t)$ (a) и кумулянта F_2 (б) в двойном логарифмическом масштабе

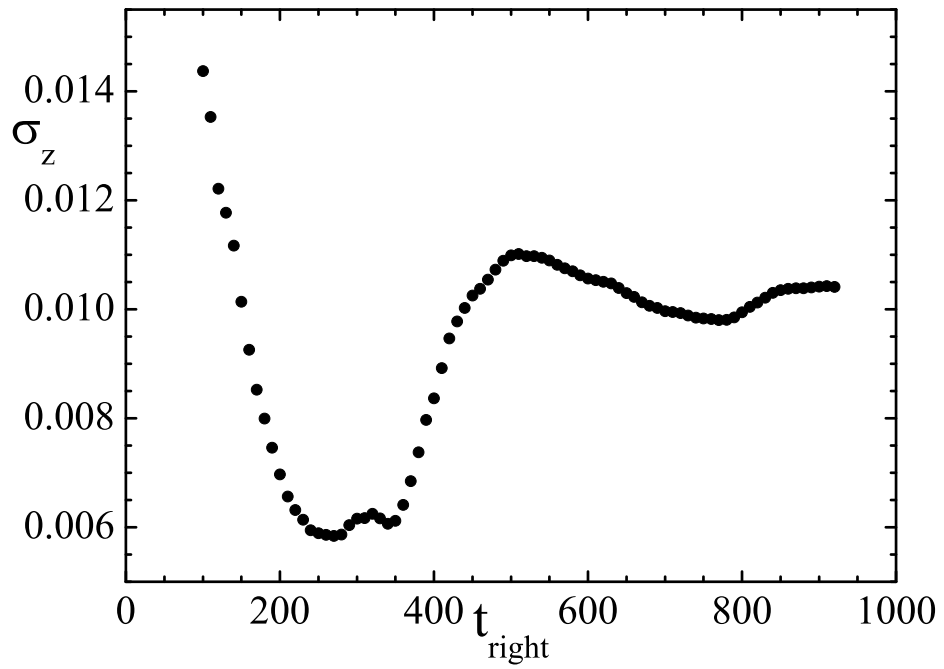


Рис. 2.5: Зависимости среднеквадратичных погрешностей аппроксимации σ_z для индекса z от временного интервала $t \in [80, t_{\text{right}}]$

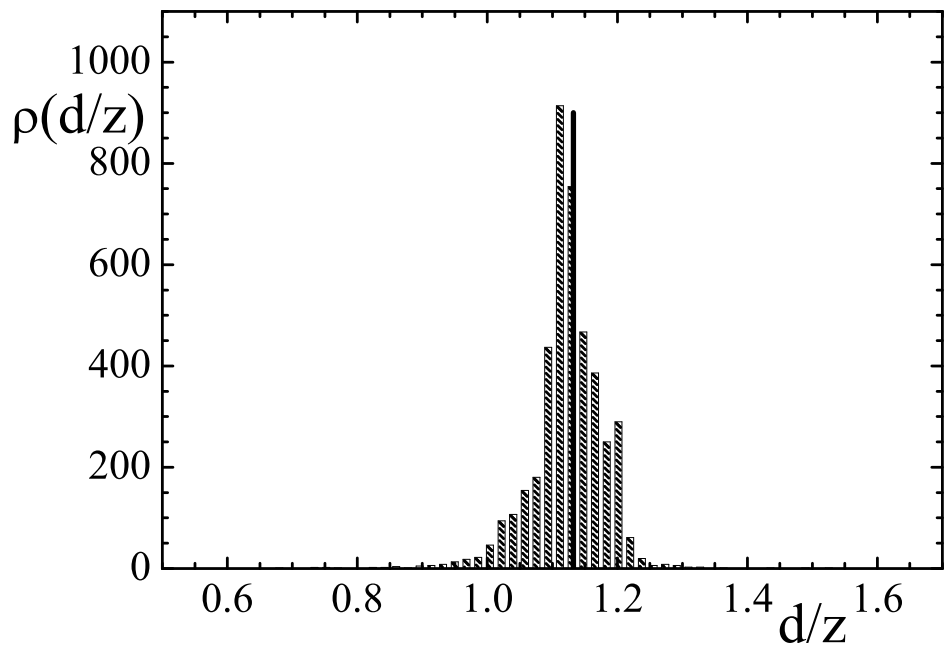


Рис. 2.6: Плотность распределения $\rho(d/z)$ по различным временным интервалам. Линия соответствует среднему значению d/z

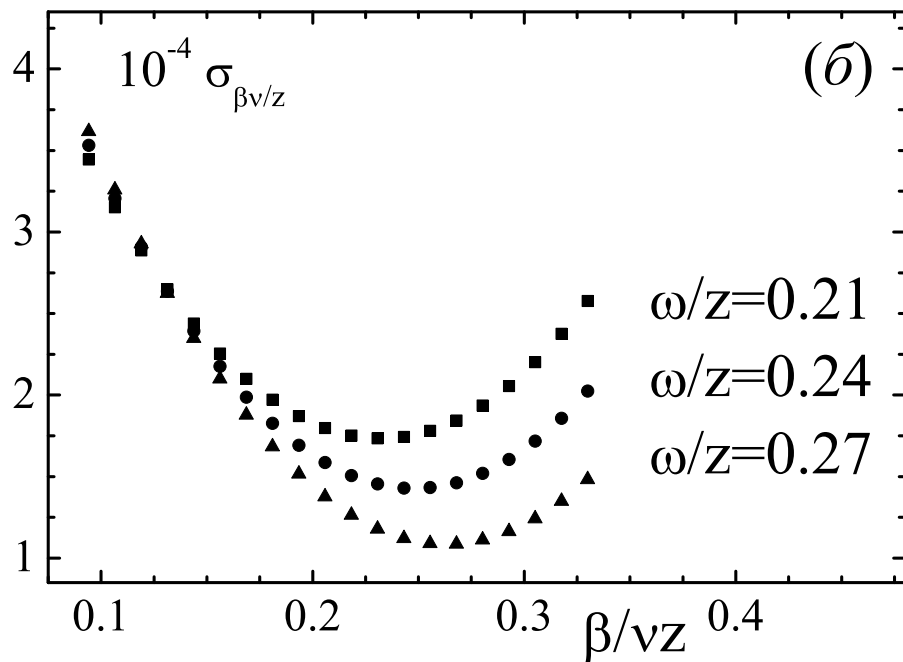
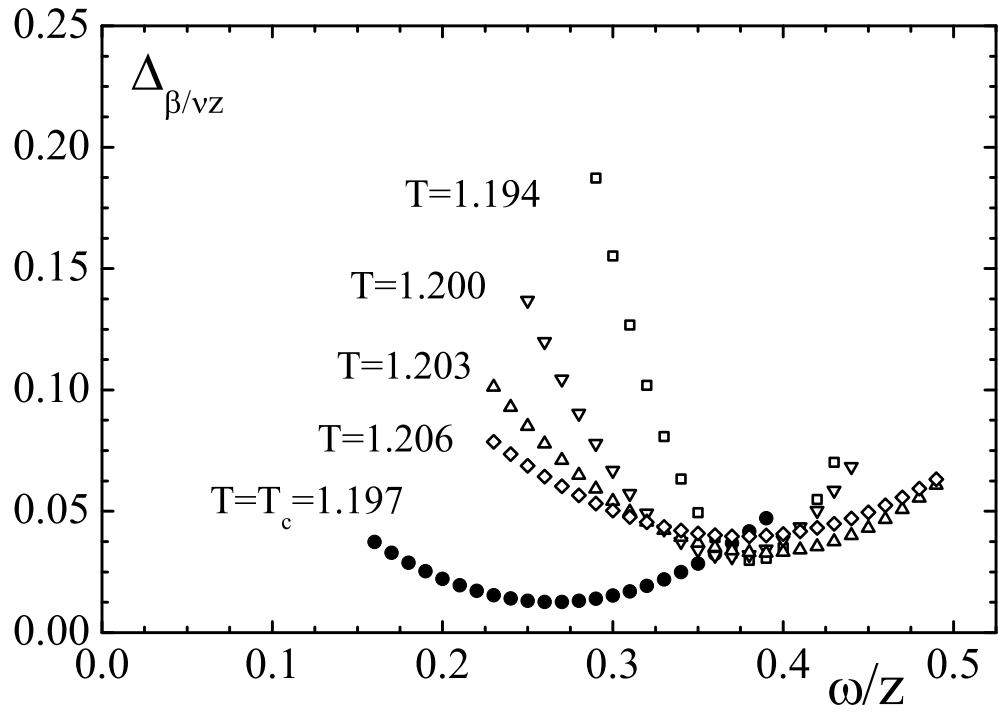


Рис. 2.7: Зависимость относительной Δ_δ (а) погрешностей от индекса ω/z для показателя $\beta/\nu z$ для различных значений температур и среднеквадратичной σ_δ погрешности (б) для различных значений ω/z

2. На каждом из участков был проведен поиск показателя δ для фиксированного значения ω/z . Поиск был осуществлен из условия минимума среднеквадратичных отклонений процедуры аппроксимации σ_δ .
3. Найденные значения δ были усреднены по выбранным участкам с определением среднего значения $\langle \delta \rangle$ и относительной погрешности Δ_δ .
4. Индекс ω/z был определен из условия минимальности значений относительных погрешностей Δ_δ .

Для нахождения зависимости относительных погрешностей Δ_δ для фиксированных значений ω/z были рассмотрены различные разбиения всего временного интервала $t \in [80, 1000]$ на отрезки различной длины. Рассмотрим интервалы с длиной от 10 MCS/s до максимально возможной длины 900 MCS/s. На каждом из таких отрезков был найден минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации. Далее были отброшены все интервалы, на которых минимум не был найден и были использованы значения показателя, полученного на тех интервалах, которые доставляют минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации. Было найдено среднее значение показателя δ по этим интервалам, а также значения относительных погрешностей Δ_δ . Вклад от интервалов разной длины был учтен, для этого были введены весовые множители, пропорциональные длинам интервалов. Относительные погрешности Δ_δ

$$\Delta_\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\delta_i - \bar{\delta})^2 \cdot \Delta t_i}{\sum_{i=1}^N \Delta t_i}} \quad (2.31)$$

рассчитываются на основе усредненных значений $\bar{\delta}$, где N число временных интервалов, на которых был найден минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации. Для аппроксимации использовался метод наименьших квадратов.

Плотность функции распределения изображена на рис. 2.6 на примере $\rho(d/z)$. На рис. 2.7a изображена зависимость относительной погрешности $\Delta_{\beta/\nu z}$ от индекса ω/z для показателя $\beta/\nu z$ для различных зна-

чений температур. Минимальная погрешность при $T = T_c = 1.197$. На рис. 2.7б изображена зависимость среднеквадратичной $\sigma_{\beta/\nu z}$ погрешности от индекса ω/z . Для каждого из показателей минимум достигается при различных значениях индекса ω . В качестве результирующего значения ω брали среднее значение $\omega = 0.786(45)$.

2.5 Эволюция из высокотемпературного начального состояния $m_0 \ll 1$

Далее исследовалась критическая эволюция системы из начальных неупорядоченных состояний с $m_0 \ll 1$. В данной работе измерялась временная эволюция намагниченности, определяемая выражением:

$$m(t) = \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \left| \sum_i^{N_s} p_i \vec{S}_i(t) \right| \right\rangle \right], \quad (2.32)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение, а квадратные скобки - усреднение по различным примесным конфигурациям, и $N_s = pL^3$ количество спинов в решетке. Двумя другими наблюдаемыми величинами в коротко-временной динамике являются второй момент намагниченности $m^{(2)}(t)$,

$$m^{(2)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i \vec{S}_i(t) \right)^2 \right\rangle \right] \quad (2.33)$$

и автокорреляционная функция

$$A(t) = \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(0) \right\rangle \right]. \quad (2.34)$$

Для конечных систем размерности d с линейным размером решетки L второй момент намагниченности $m^{(2)}(t, L) \sim L^d$. Сопоставляя этот результат со скейлинговой формой в уравнении (2.4) для $\tau = 0$ и $b = t^{1/z}$,

получаем

$$m^{(2)}(t) \sim t^{-2\beta/\nu z} m^{(2)}(1, t^{-1/z} L) \sim t^{c_2}, \quad (2.35)$$

$$c_2 = \left(d - 2\frac{\beta}{\nu}\right) \frac{1}{z}.$$

Кроме того, тщательный скейлинговый анализ показывает, что автокорреляционная функция спадает по степенному закону [69]

$$A(t) \sim t^{-c_a}, \quad c_a = \frac{d}{z} - \theta'. \quad (2.36)$$

$$\theta' = (x_0 - \frac{\beta}{\nu})/z. \quad (2.37)$$

Используя данные зависимости, были определены показатели θ' , c_2 и c_a , а на их основе вычислялись критические индексы β/ν , z . В данной работе представлено численное исследование коротко-временной динамики трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами на кубической решетке линейного размера $L = 128$ и спиновой концентрацией $p = 0.80$. Было проведено моделирование, начиная из высокотемпературного состояния или из состояния с малым значением намагниченности $m_0 = 10^{-4}$, 0.01 , 0.02 , и 0.03 . Для независимого определения динамического критического индекса z и отношения β/ν были исследованы временные зависимости второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ и автокорреляционной функции $A(t)$ для систем, для которых моделирование начиналось из высокотемпературного состояния $m_0 \ll 1$ (фактически из состояния $m_0 = 10^{-4}$). При эволюции системы из начального неупорядоченного состояния справедливы скейлинговые зависимости для намагниченности $m(t)$, второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ и автокорреляционной функции $A(t)$ в коротковременном режиме приведенные выше.

Поскольку начальная спиновая конфигурация с намагниченностью m_0 должна быть неравновесной, для ее получения был применен следующий алгоритм: с помощью алгоритма Вольфа при температуре $T = 1.45$, близкой к критической $T_c = 1.197$ [59], система из начального полностью упорядоченного состояния приводилась к состоянию с намагниченностью m , близкой к m_0 , а затем переворотом отдельных спинов получа-

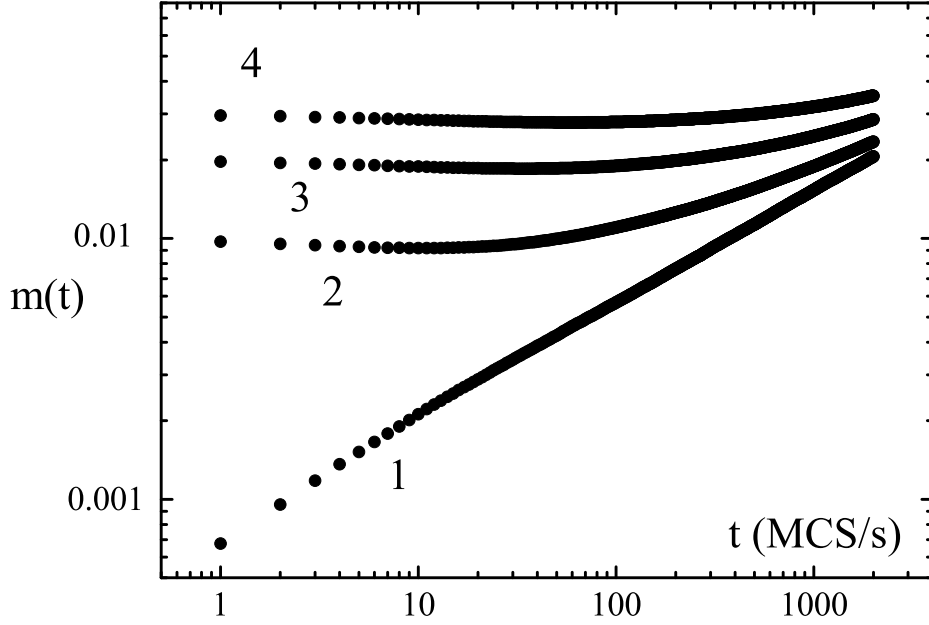


Рис. 2.8: Эволюция намагниченности для различных начальных состояний $m_0 = 10^{-4}$ (1); 0.01 (2); 0.02 (3); 0.03 (4).

лось состояние с намагниченностью m_0 . Полученная конфигурация сохранялась, и для нее проводилось моделирование до 2000 MCS/s (шагов Монте-Карло на спин) с помощью алгоритма Метрополиса при температуре $T_c = 1.197$.

В данной работе измерялась эволюция намагниченности $m(t)$ с начальных состояний $m_0 = 0.0001, 0.01, 0.02, \text{ и } 0.03$, второй момент намагниченности $m^{(2)}(t)$ и автокорреляционная функция $A(t)$ с $m_0 = 0.0001$ до $t = 2000$ MCS/s. Полученные кривые для намагниченности $m(t)$ представлены на рис. 2.8, для $m^{(2)}(t)$ на рис. 2.9а, и для $A(t)$ на рис. 2.9б, которые построены в двойном логарифмическом масштабе. Эти кривые были получены усреднение по 1500 конфигурациям примеси для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонкам. Наиболее распространенными в нашей стране вычислительными системами являются кластерные. Для подобных систем задача о критическом поведении неупорядоченных систем допускает крупно-блочную декомпозицию. Наиболее эффективная параллелизация методов Монте-Карло возникает при расчете примесной конфигурации со статистическими прогонка-

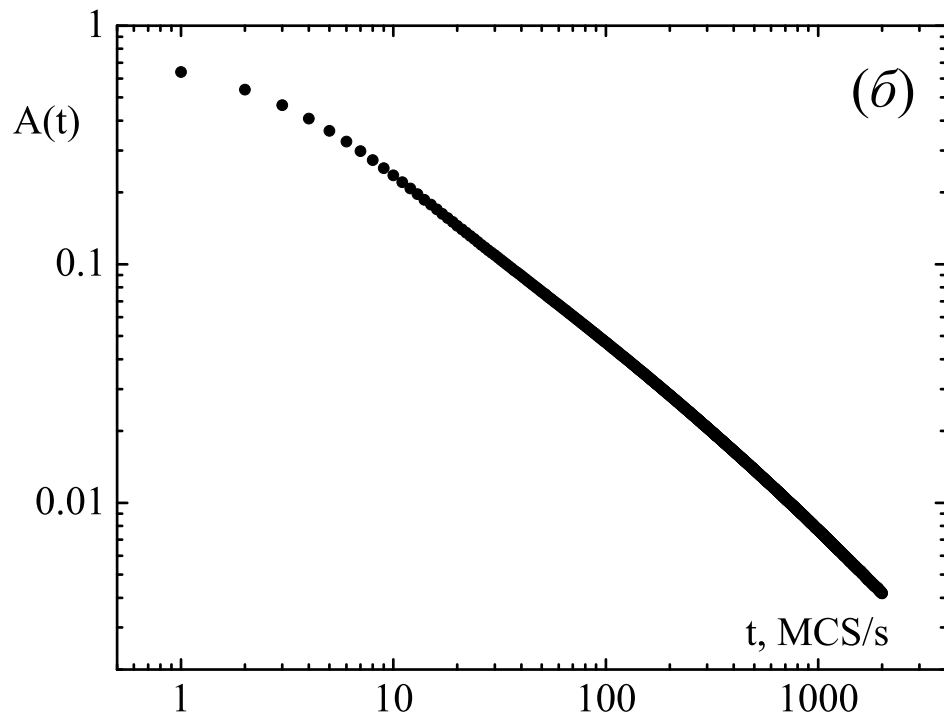
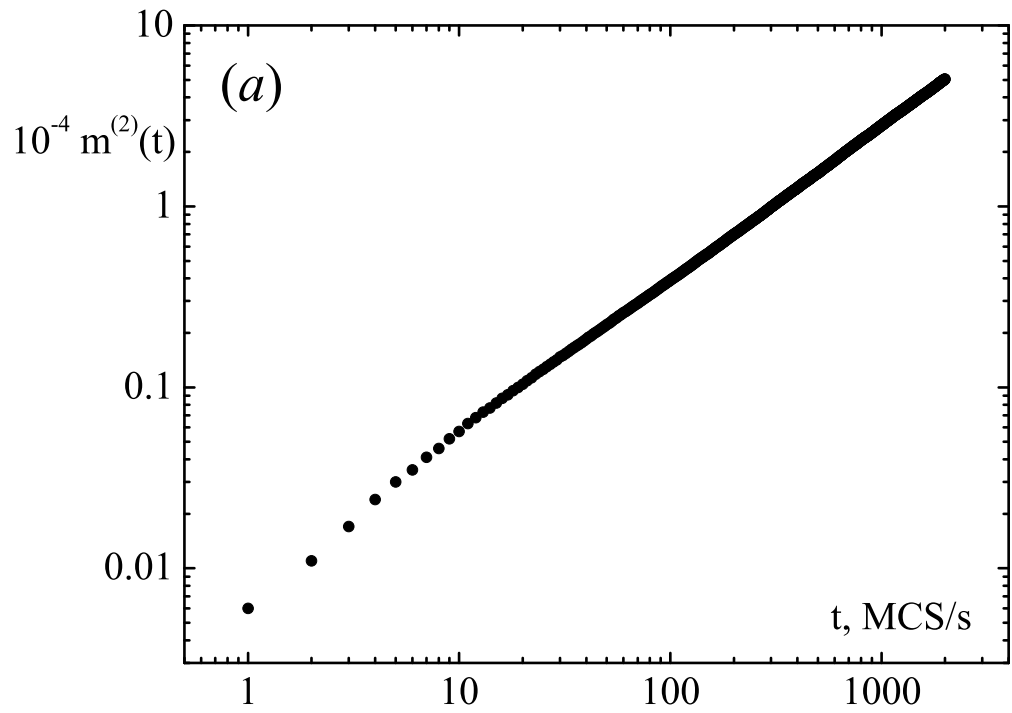


Рис. 2.9: Эволюция второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ (а) и автокорреляционной функции $A(t)$ (б) для $L = 128$ с начальной намагниченностью $m_0 = 0.0001$

ми на отдельном процессорном элементе. При этом подходе отсутствуют межсетевые обмены между процессорными элементами. Уникальной особенностью методов Монте-Карло является высокая эффективность вычислений на очень большом числе процессорных элементов.

В результате линейной аппроксимации этих кривых на интервале $t \in [1200; 1900]$ MCS/s были получены значения показателя $\theta' = 0.424(32)$, $\theta' = 0.316(28)$, $\theta' = 0.215(30)$ и $\theta' = 0.144(26)$, соответственно для начальных состояний с $m_0 = 10^{-4}$, 0.01, 0.02, и 0.03, и индексы $c_2 = 0.847(31)$ и $c_a = 0.884(23)$ согласно выражениям (2.37), (2.35), и (2.36). Итоговое значение $\theta' = 0.417(31)$ было получено путем экстраполяции к $m_0 = 0$. При использовании соотношений, связывающих показатели c_a , c_2 и θ' с критическими индексами, были определены значения $\beta/\nu = 0.523(72)$ и $z = 2.306(231)$. Интервал на котором были получены данные индексы выбирался из минимума среднеквадратичной погрешности аппроксимации исследуемых величин. Зависимости среднеквадратичной погрешности линейной аппроксимации σ_{c_a} , σ_{c_2} и $\sigma_{\theta'}$, при моделировании из начального состояния с $m_0 = 10^{-4}$, от выбора временного интервала приведены на рис. 2.10.

На следующем этапе работы осуществлялся расчет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем. Для этого применялось выражение (2.30) для временной зависимости наблюдаемых величин. Показатель $\delta = \theta'$ в случае $X \equiv m(t)$, $\delta = c_2$ в случае $X \equiv m^{(2)}(t)$, и $\delta = -c_a$ в случае $X \equiv A(t)$. Это выражение отражает скейлинговое преобразование в критической области зависящих от времени поправок к скейлингу в виде $t^{-\omega/z}$ к обычному виду поправок $\tau^{\omega\nu}$ в равновесном состоянии за время t сравнимое со временем релаксации параметра порядка $t_r \sim \xi^z \Omega(k\xi)$ [47].

При анализе полученных кривых была использована схема линейной аппроксимации для зависимости $(Xt^{-\delta})$ от $t^{-\omega/z}$ при изменении значений показателя δ , а также критического индекса ω/z . Для нахождения зависимости относительных погрешностей Δ_δ для фиксированных значений ω/z будем рассматривать различные разбиения отрезка $t \in [100, 2000]$ на интервалы различной длины. Рассмотрим интервалы с длиной от 100 MCS/s до максимально возможной длины 1900 MCS/s. На каждом из та-

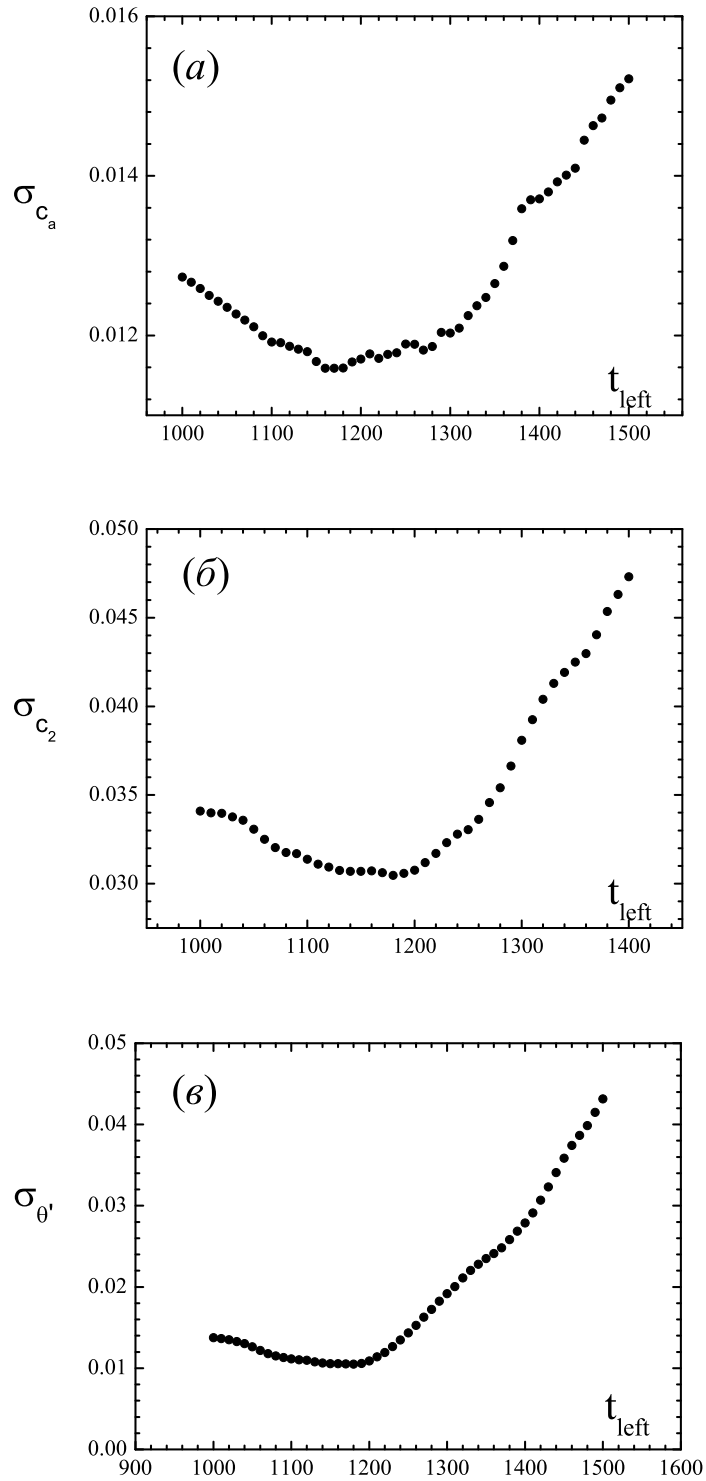


Рис. 2.10: Зависимость среднеквадратичной погрешности линейной аппроксимации для автокорреляционной функции $A(t)(a)$, второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)(b)$ и намагниченности $m(t)(c)$ от выбора временного интервала $t \in [t_{\text{left}}; 1900]$.

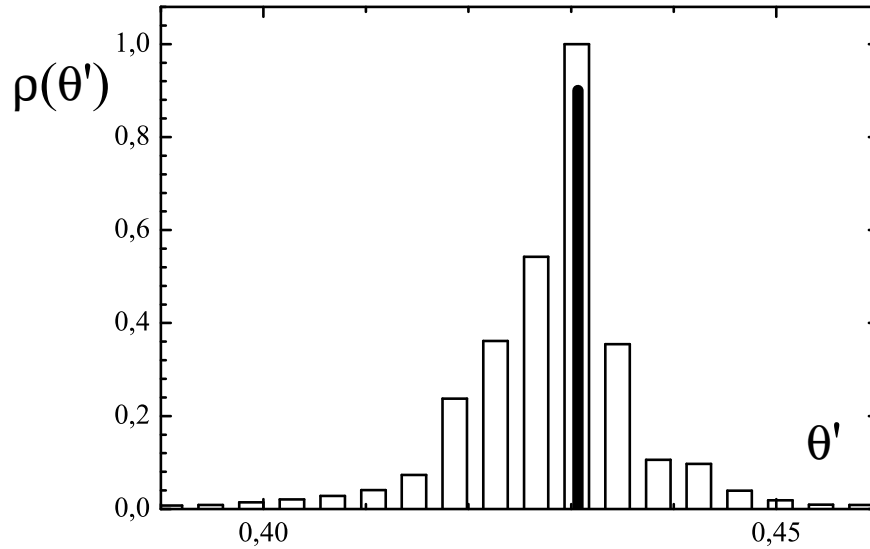


Рис. 2.11: Плотность функции распределения $\rho(\theta')$ для различных временных интервалов. Сплошная линия соответствует среднему значению показателя по различным временным интервалам $\theta' = 0.431$.

ких отрезков будем искать минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации. Далее отбросим все интервалы, на которых минимум не был найден и будем использовать значения показателя, полученного на тех интервалах, которые доставляют минимум среднеквадратичной погрешности аппроксимации. Найдем среднее значение показателя δ по этим интервалам, а также значения относительных погрешностей Δ_δ , при этом учитывать вклад от интервалов разной длины в эти значения можно, введя весовые множители, пропорциональные длинам интервалов. Для аппроксимации использовался метод наименьших квадратов. Плотность функции распределения изображены на рис. 2.11 на примере $\rho(\theta')$, при моделировании из начального состояния с $m_0 = 10^{-4}$.

На рис. 2.12а представлена зависимость среднеквадратичной погрешности σ линейной аппроксимации поведения намагниченности $m(t)$ от показателя θ' для $m_0 = 0.01$ на интервале $t \in [500, 2000]$ для $\omega/z = 0.200, 0.230, 0.260$.

На рис. 2.12б представлена зависимость глобальной среднеквадратичной погрешности $\Delta_{\theta'}$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 0.01$, минимум достигается при $\omega/z = 0.230$ на интервале $t \in [500, 2000]$. Минимуму глобальной среднеквадратичной погрешно-

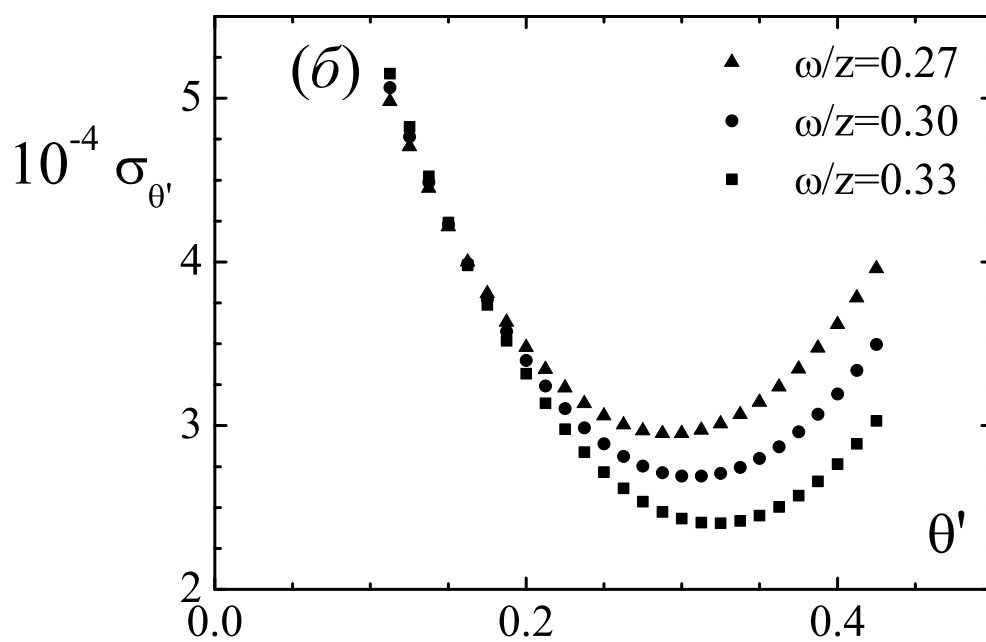
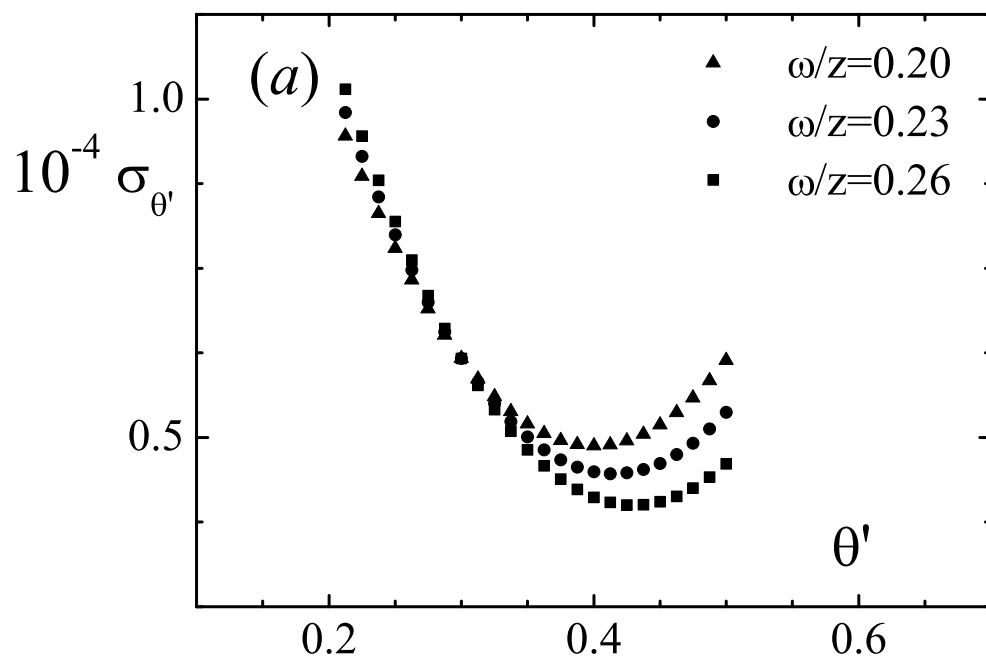


Рис. 2.12: Зависимость среднеквадратичной погрешности $\sigma_{\theta'}$ линейной аппроксимации (а) и относительной погрешности $\Delta_{\theta'}$ (б) для начального состояния $m_0 = 0.01$ для различных значений ω/z .

Таблица 2.1: Значения индексов для трехмерной неупорядоченной модели Гейзенберга при моделировании из высокотемпературного начального состояния с $p = 0.80$, полученные с учетом поправки к скейлингу.

Индекс	Значение	ω/z
$\theta'(m_0 = 0.03)$	0.223(10)	0.160
$\theta'(m_0 = 0.02)$	0.297(21)	0.300
$\theta'(m_0 = 0.01)$	0.377(12)	0.230
$\theta'(m_0 \rightarrow 0)$	0.453(26)	0.300
$c_2(m_0 = 0)$	0.947(12)	0.200
$c_a(m_0 = 0)$	0.922(20)	0.260
$(\omega/z)_{av}$	0.253(15)	

сти Δ_δ достигается при $\omega/z = 0.300$ на интервале $t \in [100, 2000]$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 0.02$, при $\omega/z = 0.160$ на интервале $t \in [900, 2000]$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 0.03$.

Минимум зависимости глобальной среднеквадратичной погрешности Δ_{c_a} достигается при $\omega/z = 0.260$ на интервале $t \in [100, 2000]$. Исследование зависимости глобальной среднеквадратичной погрешности Δ_{c_2} от ω/z показало, что минимум достигается при $\omega/z = 0.200$ на интервале $t \in [1200, 2000]$.

Полученные для неупорядоченной модели Гейзенберга итоговые значения критических индексов θ' , c_a и c_2 с учетом поправок к скейлингу приведены в таблице 2.1. В результате процедуры нахождения коррекции к скейлингу для критического индекса θ' при моделировании из состояния с $m_0 = 10^{-4}$ минимум $\Delta_{\theta'}$ не достигается. Значения показателя без учета поправки к скейлингу $\theta' = 0.424(32)$ и итоговое значение $\theta' = 0.453(26)$, полученное в результате экстраполяции к $m_0 = 0$, в пределах погрешностей совпадают. Это говорит о том, что для малых значений m_0 конечность размера моделируемой системы оказывается несущественной. Итоговые значения критических индексов $z = 2.166(85)$, $\beta/\nu = 0.580(75)$ и $\theta' = 0.477(32)$ были получены, используя среднее значение показателя $\omega/z = 0.253(15)$.

С учетом поправок к скейлингу были получены следующие значения критических индексов, приведенные в табл. 2.2. Полученные нами зна-

Таблица 2.2: Значения критических индексов для слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов и сравнение их с другими результатами моделирования методом Монте-Карло (МК) и ренормгруппового подхода (РГ)

	z	θ'	β/ν	ν	β	ω
$m_0 = 1$, [59]	2.257(61)		0.510(78)	0.770(74)	0.393(77)	0.786(45)
$m_0 \ll 1$	2.320(153)	0.453(26)	0.467(39)			0.553(77)
Prudnikov et al., 2000, [20] (РГ)	2.264		0.482	0.798	0.362	
Прудников и др., 2010, [66] (РГ)	2.291(29)		0.490(5)	0.766(17)	0.375(5)	
V. Blavats'ka et al., 2001, [5] (РГ)						0.88
Однородная система						
Medvedeva et al., 2012, [59] (МК)	2.049(31)		0.510(10)	0.705(26)	0.360(9)	
Fernandes et al., 2006, [67] (МК)	1.976(9)	0.482(3)		0.687(6)	0.361(2)	
Chen et al., 1993, [10] (МК)			0.516(10)	0.705(3)	0.364(5)	

чения показателей демонстрируют сильное влияние дальнедействующей корреляции дефектов на критическое поведение систем, описываемых многокомпонентным параметром порядка. В результате широкий класс неупорядоченных систем может характеризоваться новым типом критического поведения.

2.6 Основные результаты и выводы

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Разработана методика численного исследования неравновесного критического поведения структурно неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с дальней пространственной корреляцией дефектов в коротковременном режиме и методика определения значений универсальных критических показателей с учетом ведущих поправок к скейлингу.

2. Осуществлено компьютерное моделирование трехмерной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов различной концентрации. Были исследованы равновесные характеристики слабо ($p = 0.8$) неупорядоченной модели и рассчитано значение критической температуры $T_c(p = 0.8) = 1.197(2)$.
3. С использованием метода коротковременной динамики была исследована критическая релаксация трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами из различных начальных состояний. Для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией $p = 0.8$ были получены значения динамических и статических критических индексов $z = 2.257(61)$, $\beta = 0.393(77)$, $\nu = 0.770(74)$, $\omega = 0.786(45)$. Данные значения в пределах погрешностей находятся в хорошем согласии с теоретическими результатами.
4. Было выявлено наличие нескольких этапов динамического развития слабо неупорядоченных систем после микроскопического временного масштаба: области с характеристиками однородной системы, кроссоверной области и области, характеризующейся влиянием структурного беспорядка.
5. Впервые было получено численное подтверждение о существовании влияния дальней пространственной корреляции дефектов на критическое поведение систем с трехкомпонентным параметром порядка.

Глава 3

Критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнодействующей корреляцией дефектов.

3.1 Введение

Представления теории фазовых переходов, хорошо разработанные для однородных систем, претерпевают сильные изменения при попытках их распространения на системы со структурным беспорядком. Так, до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения как критические показатели универсальными, т.е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции, или осуществляется непрерывное изменение критических показателей с концентрацией. Поскольку возможности аналитического теоретического подхода ограничены описанием слабо неупорядоченных систем, исследование проблемы универсальности критического поведения сильно неупорядоченных систем методами компьютерного моделирования имеет большое значение [68, 70–74].

В данной работе было осуществлено изучение влияния неравновесных начальных состояний на релаксационные процессы в ферромагнитной сильно неупорядоченной системе в критической точке. Известно, что аномальные особенности в явлениях критической динамики определяются прежде всего эффектами дальнедействующей корреляции долгоживущих флуктуаций ряда термодинамических переменных. Фундаментальный интерес, в связи с этим, представляет исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния в сильно коррелированное состояние при критической температуре.

Впервые исследуется критическое поведение трехмерной сильно неупорядоченной спиновой системы с линейными дефектами структуры, описываемой моделью Гейзенберга, с гамильтонианом 2.11:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (3.1)$$

где $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ($p_i = 1$, когда узел i занят спином, и $p_i = 0$, когда узел пуст). В большинстве работ проводится исследование слабо неупорядоченных систем с концентрацией спинов $p = 0.80$ и выше. Сопоставление результатов данных работ указывает на то, что системы с концентрацией спинов от $p = 0.80$ до $p = 0.95$ принадлежат к одному и тому же классу универсальности, то есть критические индексы, описывающие поведение данных систем в критической точке, не меняются с изменением концентрации спинов в указанном диапазоне. Менее исследованными остаются сильно неупорядоченные системы с концентрацией спинов $p < 0.69$ вплоть до порога спиновой перколяции $p_c = 0.31$. При теоретическом описании поведения таких систем уже нельзя считать концентрацию дефектов малой величиной. Что сильно затрудняет или даже делает невозможным их теоретическое описание. Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной $p = 0.60$. Было проведено моделирование из начального состояния с $m_0 = 1$, что соответствует низкотемпературному пределу $T \rightarrow 0$.

3.2 Равновесные характеристики сильно неупорядоченной модели Гейзенберга

Методика вычисления для расчета критической температуры с использованием кумулянтов Биндера [75] и пересечения ξ/L [64] для слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с концентрацией спинов $p = 0.80$ была отработана в первой части данной работы и показала хорошие и надежные результаты. Поэтому для вычисления критической температуры сильно неупорядоченной модели $p = 0.60$ применялась та же методика, но с кластерным алгоритмом модифицированным для моделирования низкотемпературного поведения систем.

Кумулянт $U_4(L, T)$ имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму

$$U_4(L, T) = u\left(L^{1/\nu}(T - T_c)\right), \quad (3.2)$$

не содержащую мультипликативной зависимости от L линейного размера решетки. Данная скейлинговая зависимость кумулянта позволяет определять критическую температуру $T_c(L \rightarrow \infty)$ через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость $U_4(L, T)$ для различных L . Более того, в критической области при $T \rightarrow T_c$

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{1/\nu} \quad (3.3)$$

и следовательно, по максимальному наклону кумулянтов, соответствующих различным L в пределе $L \rightarrow \infty$, вблизи точки их пересечения можно определить критический индекс корреляционной длины ν .

Для уменьшения эффектов критического замедления используют кластерные алгоритмы Вольфа или Свендсена-Ванга [45]. В ходе численных исследований было установлено, что наличие дефектов структуры большой концентрации приводит к существенному понижению критической температуры, так что однокластерный алгоритм Вольфа становится не применим, так как вероятность переворота кластера значительно уменьшается в низкотемпературной области. Кластерный алгоритм мо-

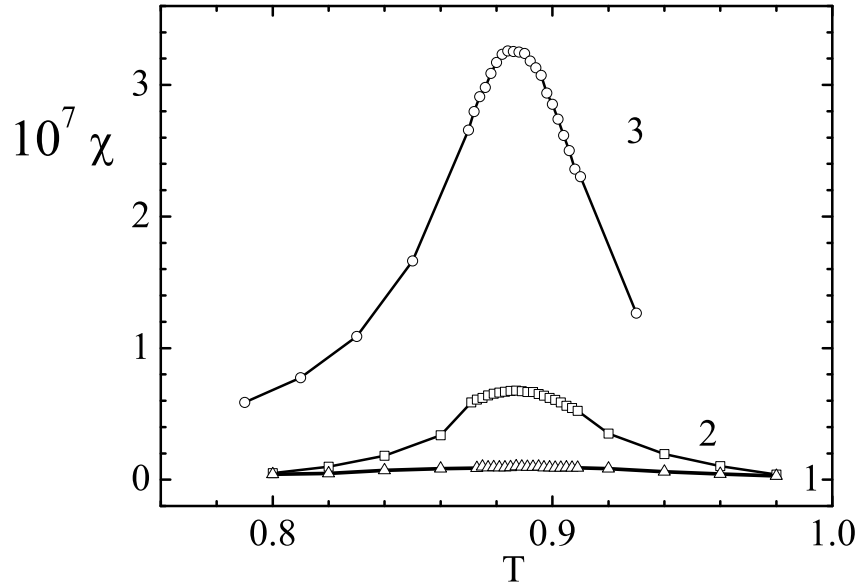


Рис. 3.1: Температурное поведение восприимчивости χ для различных линейных размеров решетки $L = 32$ (1), 48 (2) и 64 (3).

делирования должен обязательно модифицироваться многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга.

Однако, перед переворотом всех кластеров каждый из них должен быть распознан. Для этой цели был использован оптимизированный алгоритм поиска Хошена-Копельманна [76]: каждому спину в кластере присвоено целое число, в качестве метки для кластера выбирается наименьшее из этих чисел.

На первом этапе для оценки значения критической температуры была рассчитана температурная зависимость восприимчивости

$$\chi \sim [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2 \quad (3.4)$$

для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$. По положению максимума температурной зависимости восприимчивости на рисунке 3.1 была оценена область значений критической температуры $T_c \approx 0.90$ в единицах обменного интеграла. Для уточнения значения критической температуры были рассчитаны температурные зависимости кумулянта Биндера и отношения ξ/L для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$, изображенные на рисунке 3.2.

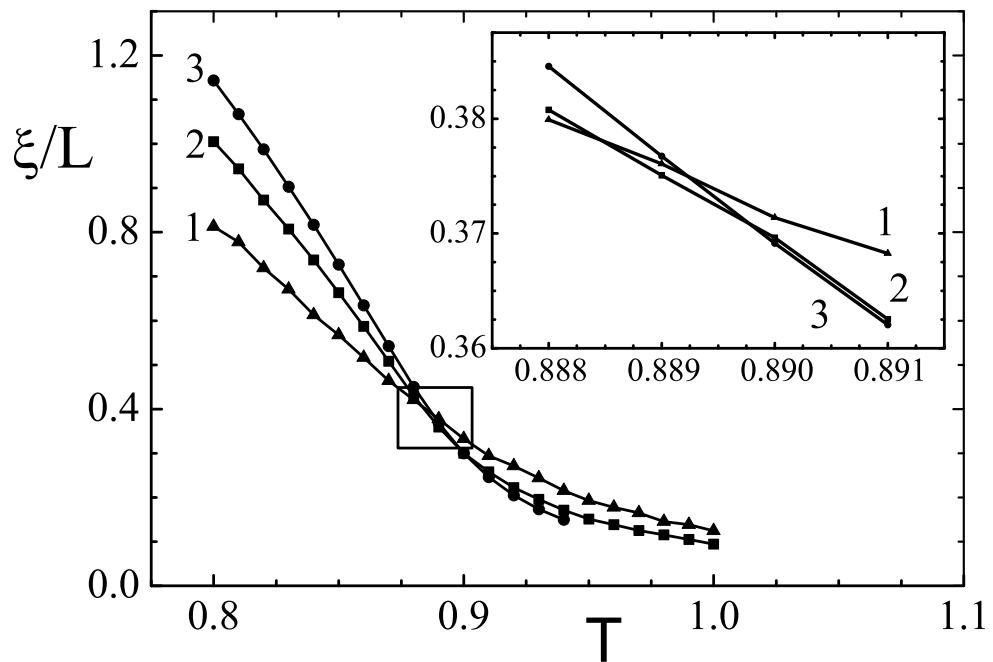
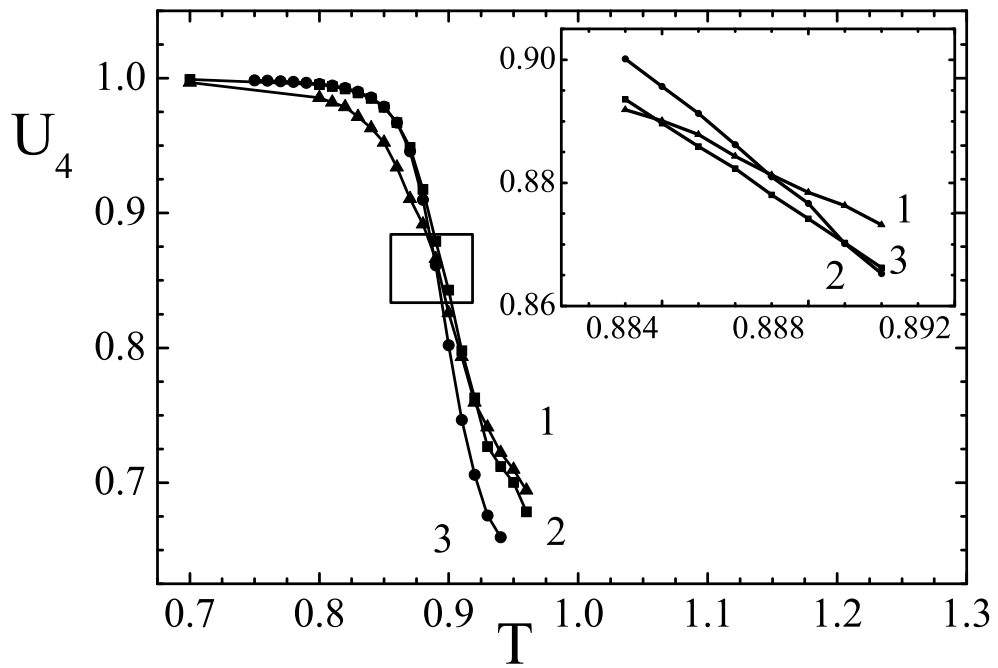


Рис. 3.2: Зависимость кумулянта Биндера U_4 (а) и отношения ξ/L (б) от температуры для разных линейных размеров решетки $L = 32$ (1), $L = 48$ (2) и $L = 64$ (3).

Представленные на рис. 3.2 зависимости были получены усреднением по 2100 конфигурациям примеси для $L = 32$, по 1100 для $L = 48$ и по 400 для $L = 64$ для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонкам. Для расчета одной конфигурации для системы с линейным размером $L = 64$ на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного программирования требуется порядка 100 часов машинного времени. Была произведена оценка времени счета одной конфигурации для более крупных решеток. Для $L = 96$ требуется 240 часов и для $L = 128$ требуется 670 часов (примерно один месяц вычислений). Такое время счета значительно усложняет расчет критического поведения характеристик для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга, по сравнению со слабо неупорядоченной моделью Гейзенберга.

Через координату точки пересечения кривых $U_4(L, T)$ и $\xi/L(L, T)$, представленных на рис. 3.2, были определены значения критической температуры $T_c = 0.887(5)$ и $T_c = 0.889(2)$, соответственно. В качестве итогового значения критической температуры было взято среднее значение $T_c = 0.888(5)$.

Используя выражение (3.3), были получены значения критического индекса корреляционной длины ν для различных линейных размеров $L = 32, 48, 64$ и для различных значений температуры выше критической. Известно, что фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц в ней стремятся к бесконечности. Таким образом эффективное значение критического показателя может быть найдено в пределе $T \rightarrow T_c$ и $L \rightarrow \infty$. Реализация данной процедуры для представленной на рис. 3.3 зависимости позволяет рассчитать асимптотическое значение индекса $\nu = 0.758(10)$ для слабонеупорядоченной и $\nu = 0.821(14)$ для сильнонеупорядоченной модели Гейзенберга. В работе [10] получено значение критического индекса $\nu = 0.7048(30)$ для однородной модели Гейзенберга. Сравнивая эти значения, можно сделать вывод, что данные системы принадлежат к разным классам универсальности. Построенные зависимости кумулянта U_4 от $(T - T_c)L^{1/\nu}$ для полученных значений ν ,

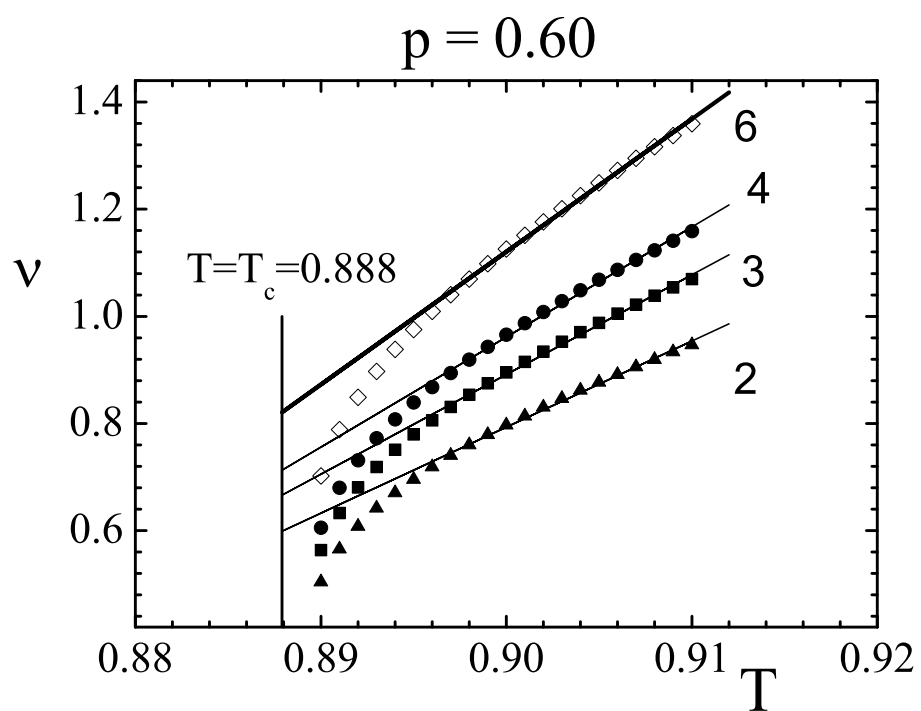
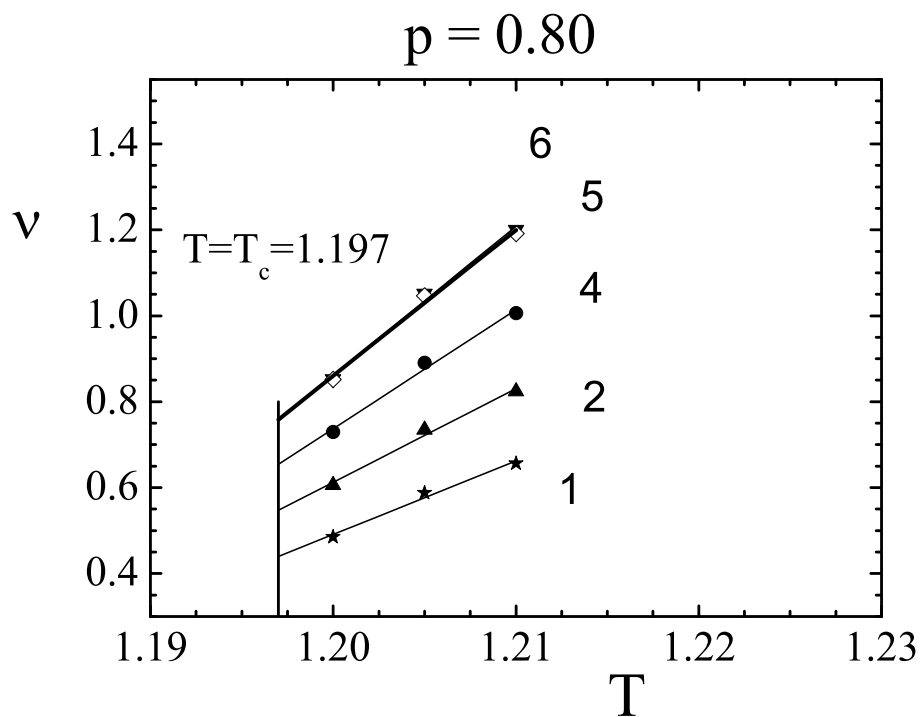


Рис. 3.3: Температурная зависимость показателя $\nu(T, L)$ $L = 16$ (1), $L = 32$ (2), $L = 48$ (3), $L = 64$ (4), $L = 128$ (5) и $L = \infty$ (6)

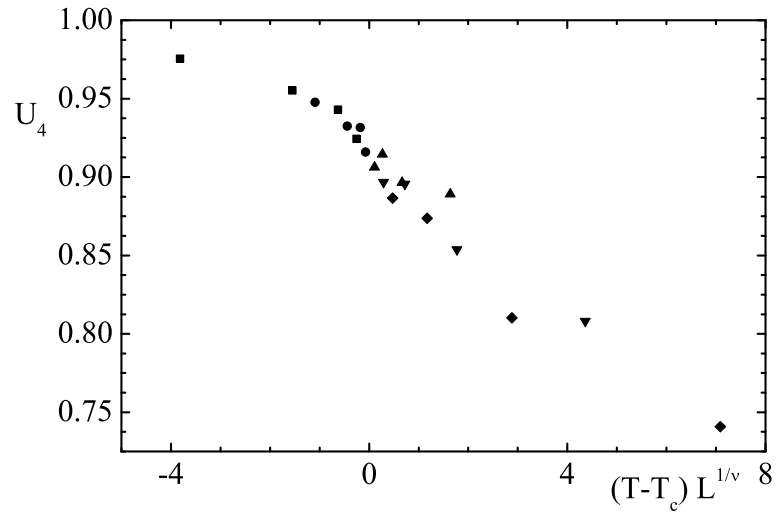


Рис. 3.4: Кумулянт U_4 для слабо неупорядоченной модели Гейзенберга для различных значений температур $T = 1.190 - 1.210$.

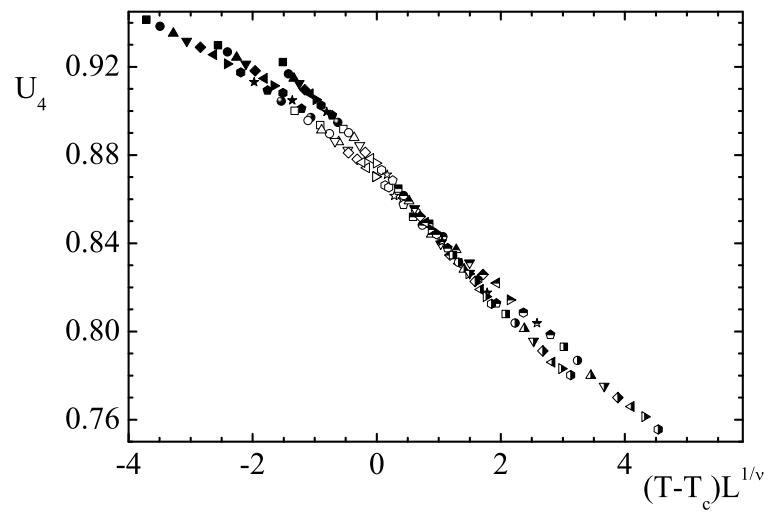


Рис. 3.5: Кумулянт U_4 для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга для различных значений температур $T = 0.872 - 0.910$.

изображенные на рис. 3.4-3.5, демонстрирует достаточно хорошее выполнение скейлингового соотношения (3.2).

3.3 Исследование неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Гейзенберга из начального низкотемпературного состояния

При найденной критической температуре $T_c = 0.888(5)$ было осуществлено численное исследование неравновесной критической динамики в коротковременном режиме для трехмерной сильно неупорядоченной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией $p = 0.60$ с линейными дефектами. Было осуществлено моделирование критической релаксации системы из полностью упорядоченного начального состояния с начальной намагниченностью $m_0 = 1$. Для моделирования неравновесного критического поведения был использован алгоритм Метрополиса.

При критической температуре $\tau = 0$ релаксация намагниченности характеризуется степенным законом

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (3.5)$$

Для независимого определения динамического критического индекса z была исследована временная зависимость кумулянта Биндера второго порядка $U_2 = m^{(2)}/m^2 - 1$ со скейлинговой зависимостью

$$U_2(t, L) \sim t^{d/z}, \quad (3.6)$$

где $d = 3$ - размерность системы.

На рисунке 3.6 в двойном логарифмическом масштабе представлена временная зависимость кумулянта Биндера второго порядка для различных линейных размеров решетки $L = 64, 128$ при значении температуры $T = T_c = 0.888$. Данные были получены усреднением по 100 конфигурациям примеси, для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонкам. Используя выражение (3.6), были получены значения показателей $d/z = 0.737(59)$ и $d/z = 0.737(84)$, соответственно для $L = 64$ и $L = 128$. Временные зависимости кумулянта $U_2(t)$ для различных L характеризуются одинаковыми значениями показателей. Следовательно

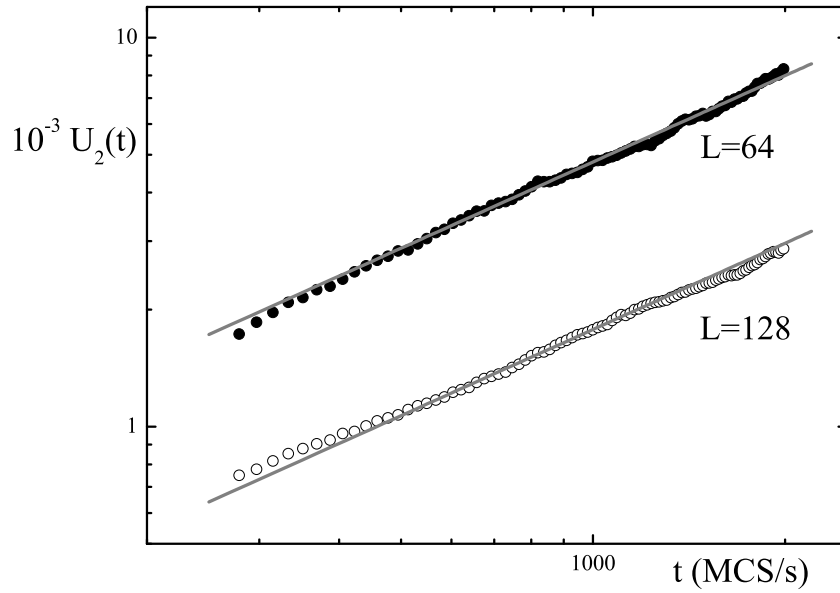


Рис. 3.6: Временная зависимость кумулянта U_2 для различных линейных размеров решетки $L = 64$ и $L = 128$ при значении температуры $T = T_c = 0.888$.

получать корректные значения критических индексов можно, исследуя критическое поведение системы с меньшим линейным размером решетки $L = 64$, что значительно упрощает исследовательский процесс. Для расчета одной конфигурации примеси на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного программирования для решетки с $L = 64$ требуется 3.5 часа и для решетки с $L = 128$ требуется 47 часов.

Временные зависимости намагниченности $m(t)$ и кумулянта Биндера второго порядка $U_2(t)$ представлены на рисунке 3.7. Данные получены усреднением по 1200 конфигурациям примеси, каждая из которых усреднялась по 25 прогонам. Значения показателей $\beta/\nu z = 0.176(4)$, $d/z = 0.691(30)$ и соответствующие им значения критических индексов $\beta/\nu = 0.765(42)$, $z = 4.343(188)$ были получены с помощью линейной аппроксимации на интервале $t \in [260; 1330]$. Данный интервал был выбран из минимума среднеквадратичной погрешности аппроксимации изображенной на рисунке 3.8.

Для учета влияния конечности моделируемых систем был осуществлен расчет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин. Для этого применялось следующее выражение для временной зави-

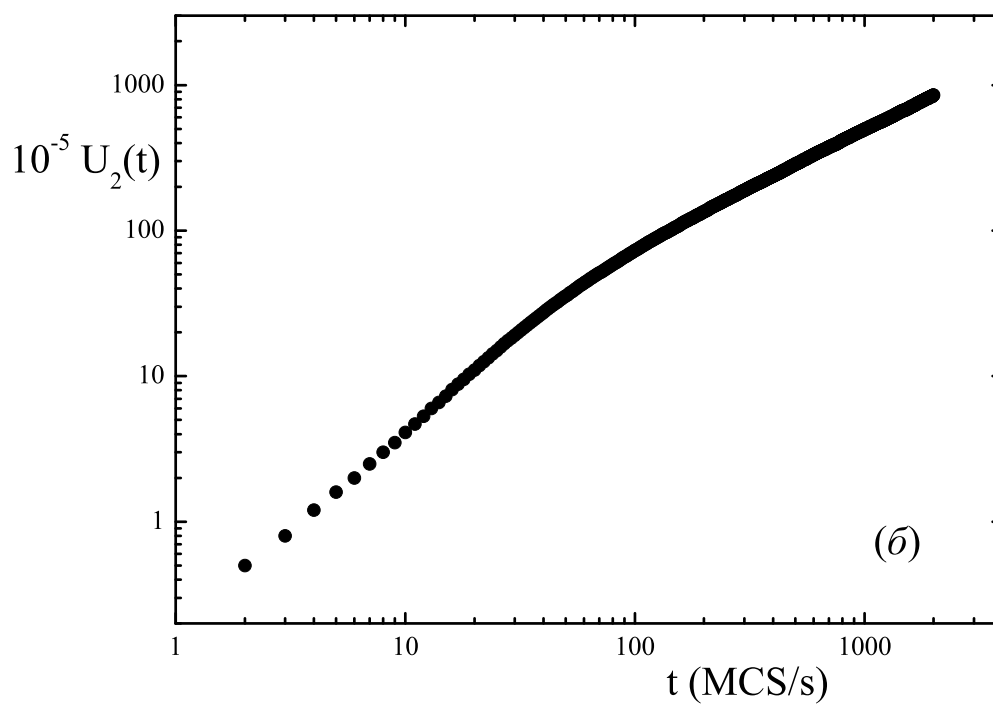
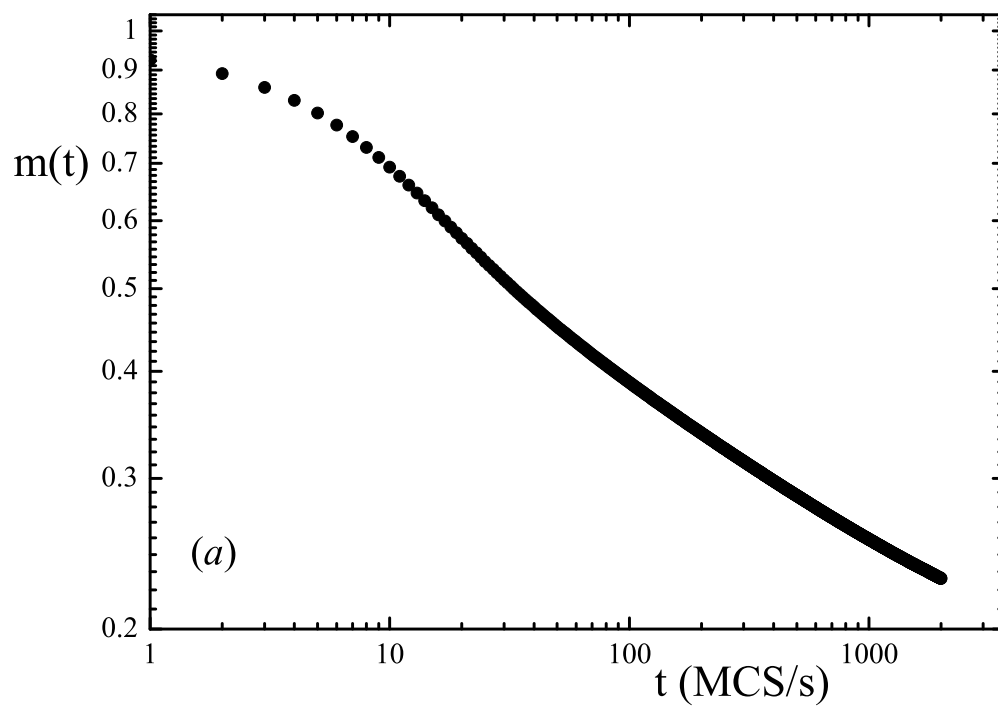


Рис. 3.7: Временная зависимость намагниченности $m(t)$ (а) и кумулянта Биндера $U_2(t)$ (б) для линейного размера решетки $L = 64$ при температуре $T = T_c = 0.888$.

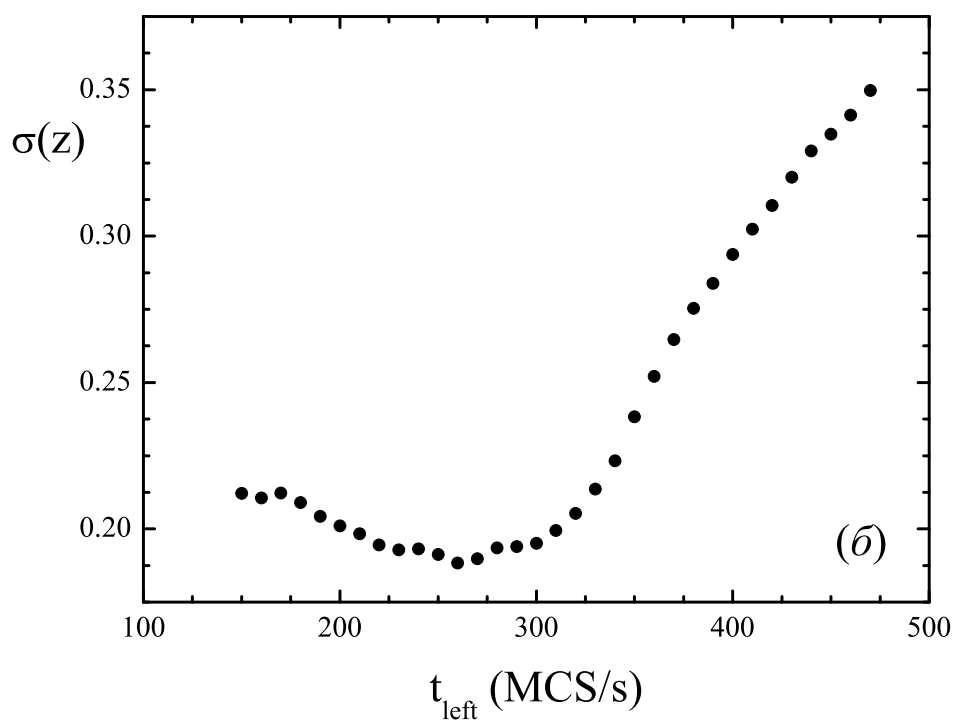
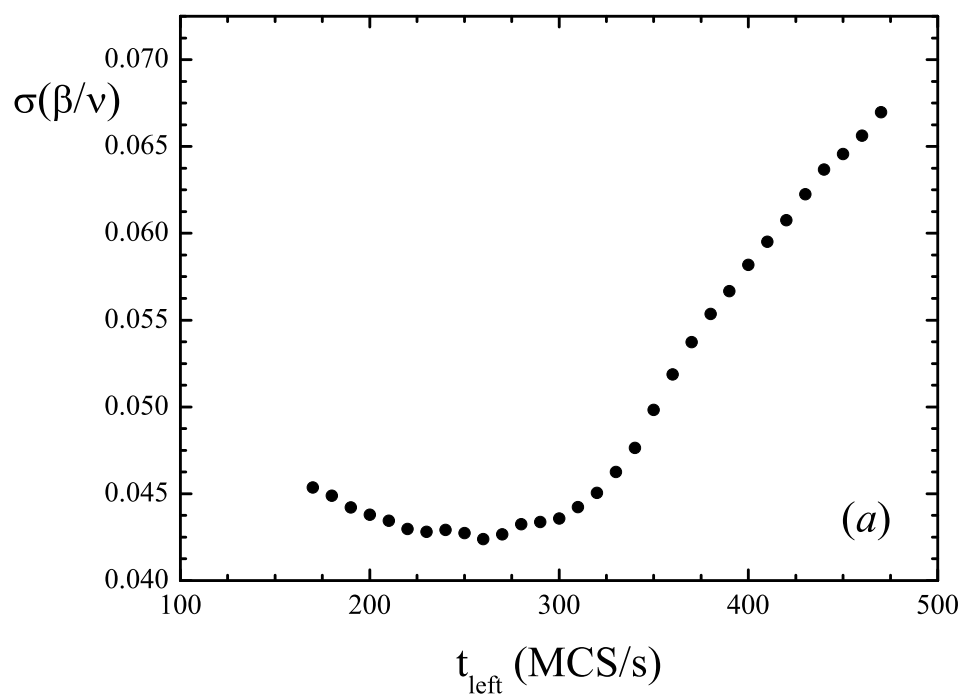


Рис. 3.8: Зависимость среднеквадратичной погрешности аппроксимации от выбора временного интервала $[t_{\text{left}}; 1330]$ для индексов β/ν (а) и z (б).

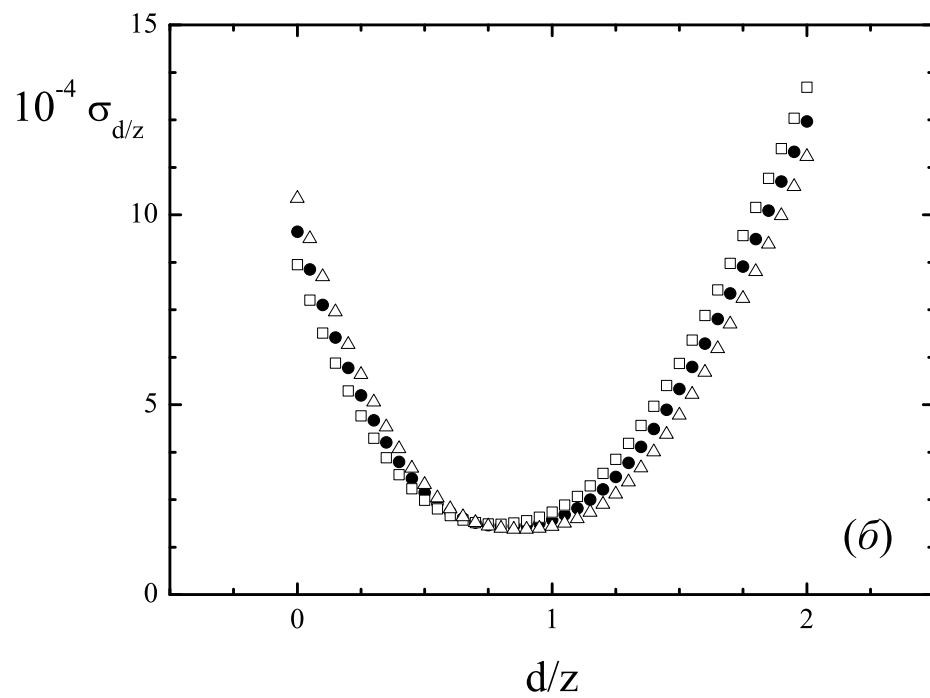
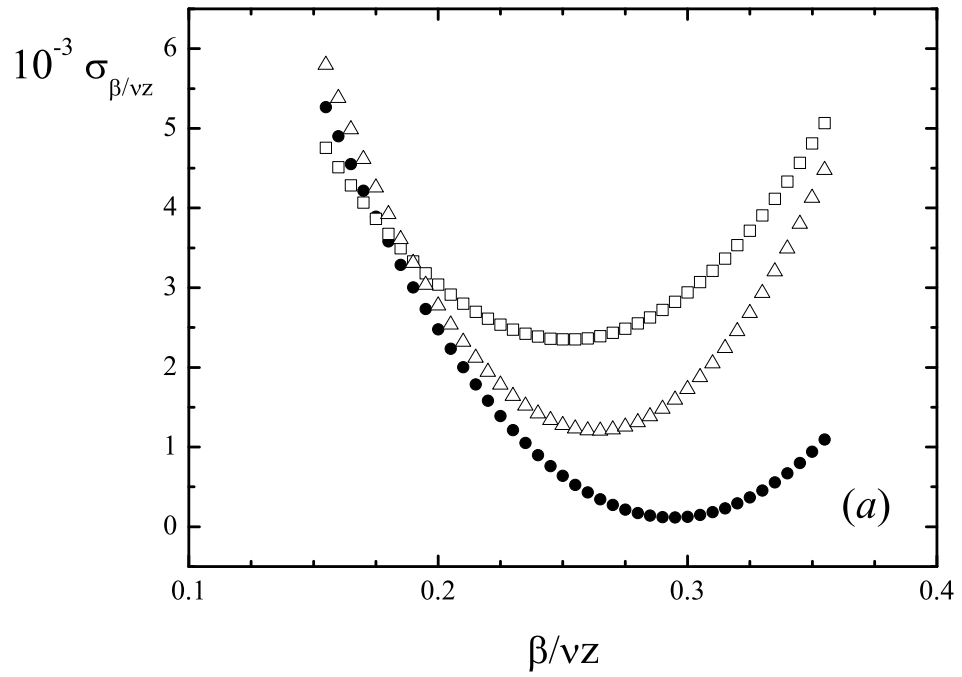


Рис. 3.9: Зависимость среднеквадратичной погрешности аппроксимации $\sigma_{\beta/\nu z}$ (а) и $\sigma_{d/z}$ (б) для различных значений индекса ω/z : \square - $\omega/z = 0.15$, \bullet - $\omega/z = 0.25$, \triangle - $\omega/z = 0.35$.

Таблица 3.1: Значения критических показателей трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами структуры

	z	ν	β/ν	β	ω
	сильно неупорядоченные системы $p = 0.6$				
Прудников, Медведева, 2014, [77]	3.529(125)	0.821(14)	0.946(48)		0.882(49)
	слабо неупорядоченные системы $p = 0.8$				
Prudnikov, Medvedeva, 2012, [59]	2.257(61)	0.770(74)	0.510(78)	0.393(77)	0.786(45)
Prudnikov et al., 2000, [20]	2.264	0.798	0.482	0.384	
	однородные системы $p = 1.0$				
Chen et al., 1993, [10]		0.7048(30)	0.5159(85)	0.3636(45)	
Prudnikov et. al., 2008, [80]	2.020(7)				
Prudnikov, Medvedeva, 2012, [59]	2.049(31)	0.705(26)	0.510(10)	0.360(9)	

симости наблюдаемых величин $X(t)$:

$$X(t) = A_x t^\delta (1 + B_x t^{-\omega/z}), \quad (3.7)$$

где ω является критическим индексом поправки к скейлингу, A_x и B_x коэффициенты разложения, и показатель $\delta = -\beta/\nu z$ в случае $X \equiv m(t)$ и $\delta = d/z$ в случае $X \equiv U_2(t)$. При анализе полученных кривых была использована схема линейной аппроксимации для зависимости $(Xt^{-\delta})$ от $t^{-\omega/z}$ при изменении значений показателя δ , а также критического индекса ω/z . На рис. 3.9 приведены значения среднеквадратичных погрешностей аппроксимации σ_δ исследуемых временных зависимостей намагниченности (рис. 3.9a) и кумулянта (рис. 3.9б) как функций показателей $\beta/\nu z$ и d/z при различных значениях индекса ω/z . Наименьшее значение σ_δ принимает при $\omega/z = 0.25$. По минимуму σ_δ были определены значения показателей $\beta/\nu z = 0.268(4)$ и $d/z = 0.850(30)$ и соответствующие им значения критических индексов $\beta/\nu = 0.946(48)$, $z = 3.529(125)$ (таб. 3.1).

3.4 Исследование эффектов старения

Главной особенностью неравновесного поведения систем с медленной динамикой является нарушение трансляционной инвариантности во вре-

мени за счет долговременного влияния неравновесных начальных состояний таких систем. Это находит проявление прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. В таких системах наблюдаются свойства старения [81].

Под процессом старения материалов понимают явление роста времени релаксации системы к состоянию равновесия с увеличением «возраста» материала, т.е. времени прошедшего после приготовления образца. Явление старения проявляется математически прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. При неравновесных процессах эти функции зависят от двух переменных временной природы: t и t_w , при $t > t_w$, и не только от их разницы, но и от каждой в отдельности. Причем эта зависимость сохраняется и при достаточно больших временах наблюдения t . Временная переменная t_w характеризует возраст образца, т.е. время, прошедшее после его приготовления, и называется временем ожидания. При явлении старения процесс релаксации системы как функции времени наблюдения t замедляется тем больше, чем больше возраст образца, т.е. с увеличением времени ожидания t_w .

В данной диссертационной работе были исследованы эффекты старения, проявляющиеся в двухвременной зависимости корреляционных функций и функций отклика от времени приготовления образца t_w и времени наблюдения $t - t_w$, а также в нарушении флуктуационно-диссипативного отношения, которое связывает динамическую функцию отклика $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{1}{kT} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (3.8)$$

где t_w - время ожидания,

$t - t_w$ - время наблюдения.

Флуктуационно-диссипативное отношение:

$$X(t, t_w) = kT \cdot R(t, t_w) \left(\frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \right)^{-1}. \quad (3.9)$$

В состоянии равновесия $X(t, t_w) = 1$.

$$X_{inf} = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) \quad (3.10)$$

характеристика неравновесного поведения систем с медленной динамикой.

В работе осуществлялся расчет автокорреляционной функции $A(t, t_w)$

$$A(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle \right] - [\langle m(t_w) \rangle][\langle m(t) \rangle] \sim (t - t_w)^{-\lambda} \quad (3.11)$$

и магнитной восприимчивости $\chi(t, t_w)$

$$\chi(t, t_w) = \overline{\left[\left\langle \frac{1}{h^2 pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \vec{h}_i \vec{S}_i \right\rangle \right]}, \quad (3.12)$$

где время ожидания принимает значения $t_w = 50, 250, 500, 1000$. Данные зависимости автокорреляционных функций для слабо $p = 0.80$ и сильно $p = 0.60$ неупорядоченной модели Гейзенберга представлены на рис. 3.10. Моделирование проводилось для решеток с линейным размером $L = 64$ при значении температур $T = T_c(p = 0.80) = 1.197$ [59] и $T = T_c(p = 0.60) = 0.888$.

Для вычисления $\chi(t, t_w)$ в момент времени t_w к гамильтониану добавлялось возмущение $\sum_i \vec{h}_i \vec{S}_i$, где магнитное поле случайно задавалось в узлах решётки с бимодальным распределением $\pm h$ для каждой оси. Черта означает усреднение по реализациям магнитного поля на решётке.

Был осуществлен расчет флуктуационно-диссипативного отношения для различных времен ожидания t_w для слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем (рис. 3.11).

Показано, что в неравновесном поведении модели Гейзенберга с линейными дефектами наблюдаются эффекты старения. Проведен расчет флуктуационно-диссипативных отношений $X_{inf} = 3.48(15)$ ($p = 0.8$), $X_{inf} = 3.38(30)$ ($p = 0.6$) [82]. Полученное значение X_{inf} в неравно-

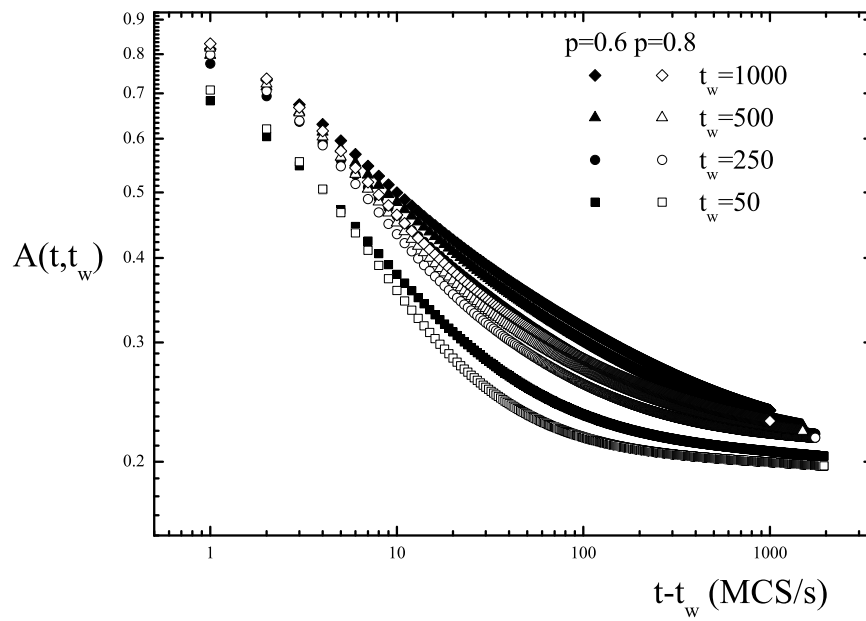


Рис. 3.10: Поведение автокорреляционной функции $A(t, t_w)$ для различных времен ожидания t_w для слабо ($p = 0.80$) и сильно ($p = 0.60$) неупорядоченных систем.

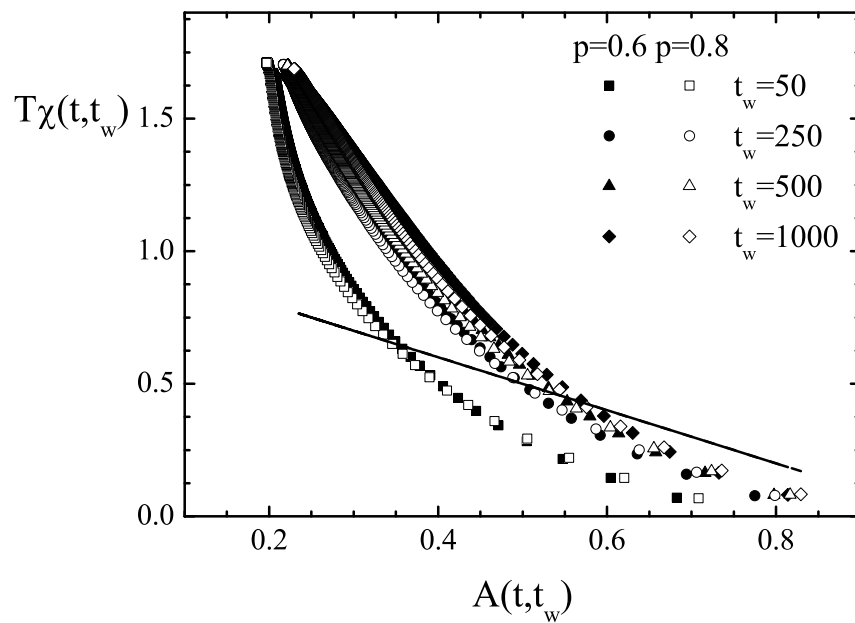


Рис. 3.11: Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для различных времен ожидания t_w для слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем

весном режиме для неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами носит универсальный характер.

3.5 Основные результаты и выводы

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Осуществлено компьютерное моделирование трехмерной сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов различной концентрации. Было рассчитано значения критической температуры $T_c(p = 0.6) = 0.888(5)$.
2. С использованием метода коротковременной динамики была исследована критическая релаксация трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами из полностью упорядоченного начального состояния. Для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с концентрацией спинов $p = 0.6$ были получены значения статических критических индексов $\nu = 0.821(14)$, $\beta = 0.777(53)$ и динамического критического индекса $z = 3.529(125)$.
3. Показано, что слабо и сильно неупорядоченные модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов принадлежат к разным классам универсальности. Выявлено, что увеличение концентрации дефектов структуры с дальнедействующей корреляцией приводит к существенному замедлению процессов критической релаксации по сравнению с однородными и слабо неупорядоченными системами.
4. Показано, что в неравновесном поведении модели Гейзенберга с линейными дефектами наблюдаются эффекты старения. Проведен расчет флуктуационно-диссипативных отношений $X_{inf} = 3.48(15)$ ($p = 0.8$), $X_{inf} = 3.38(30)$ ($p = 0.6$). Полученное значение X_{inf} в неравновесном режиме для неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами носит универсальный характер.

Глава 4

Численное исследование критических свойств ТОНКИХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК.

4.1 Введение

В последнее время уделяется большое внимание изучению свойств тонких магнитных пленок. Подобный интерес вызван, прежде всего связан с тем, что изучение физических свойств ферромагнитных пленок способствует решению фундаментальных проблем физики магнитных явлений, развитию теории ферромагнетизма [83–86]. Изучение тонких пленок существенно расширило представления о физической природе анизотропии ферромагнетиков, позволило выявить и исследовать разнообразные процессы перемагничивания, обнаружить новые физические явления. Одно из таких явлений - гигантское магнитосопротивление [87,88], которое стало предметом всестороннего исследования. Также очень важно, что в пленках можно реализовать структурные состояния, которые трудно или невозможно получать в объемных образцах. Это существенно расширяет возможности исследования связи между структурными характеристиками и физическими свойствами магнитных материалов. Изучение физических свойств тонких ферромагнитных пленок также актуально с точки зрения их практического применения в микроэлектронике и вычислительной технике. Важнейшим применением пленок

является их использование в качестве магнитной среды для записи и хранения информации в запоминающих устройствах. Магнитные пленки имеют особенности, благодаря которым их использование способствует повышению плотности записи информации до 1 TBit/in² [89, 90] и быстрой скорости. В этом смысле важно понять эволюцию намагниченности в тонких магнитных пленках с изменением температуры, особенно при температурах, близких или выше температуры Кюри.

Фундаментальным свойством магнитных пленок является магнитная анизотропия, характеризующаяся типом симметрии, ориентацией осей легкого намагничивания, энергетическими константами или напряженностью эффективного поля анизотропии. Наряду с магнитостатической анизотропией формы и естественной кристаллографической магнитной анизотропией в монокристаллических магнитных пленках, в текстурированных поликристаллических пленках (Co, MnBi и др.) может существовать значительная наведенная анизотропия различной природы: магнитоупругая (магнестрикционная) анизотропия; анизотропия направленного упорядочения атомов, осуществляющегося в процессе роста и термообработки магнитной пленки; анизотропия направленного роста зерен; ориентация вытянутых пор; анизотропия распределения магнитных и немагнитных примесей по границам зерен и др. При осаждении пленок после термического испарения в вакууме в магнитной пленке возникает анизотропия, вызванная наклонным падением атомов на подложку с образованием цепочек кристаллитов (механизм самозатенения), с наклонной столбчатой структурой. При эпитаксиальном росте магнитной пленки из жидкой фазы со сложным ионным составом, например пленок редкоземельных ферритов-гранатов, возникает ростовая анизотропия, обусловленная избирательным осаждением различных ионов в "открытые" додекаэдрические позиции определенной плоскости роста.

Результирующая анизотропия определяет тип магнитной доменной структуры и характер процессов намагничивания магнитной пленки. В пленках с преобладающей анизотропией формы спонтанная намагниченность лежит в плоскости образца, и в этом случае образуются вытянутые так называемые плоские магнитные домены (ПМД). Основным процессом перемагничивания таких магнитных пленок вдоль оси легко-

го намагничивания является движение доменных стенок, наблюдается прямоугольная петля гистерезиса с коэрцитивной силой, равной полю старта необратимого смещения стенок (границ).

В пленках с преобладающей перпендикулярной анизотропией ось легкого намагничивания (ОЛН) ориентирована по нормали к поверхности. В таких магнитных пленках образуются круглые цилиндрические магнитные домены (ЦМД), плотная полосовая или лабиринтная доменная структура. В чистых, практически бездефектных пленках, петля гистерезиса очень узкая и наклоненная. В определенном интервале значений внешнего поля, приложенного вдоль ОЛН, наблюдаются равновесные ЦМД, которые легко передвигаются по пленке под действием неоднородного магнитного поля.

4.2 Анизотропная модель Гейзенберга

В данной главе исследовались тонкие ферромагнитные пленки в рамках анизотропной модели Гейзенберга. Гамильтониан системы выбирался следующим образом [91]:

$$H = -J \sum_{i,j} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \quad (4.1)$$

где $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – это трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, Δ – константа анизотропии ($\Delta = 0$ – изотропная модель Гейзенберга, $\Delta = 1$ – модель Изинга).

Моделирование проводилось на простых кубических решетках размера $N_s = L \times L \times N$ с периодическими граничными условиями в плоскости пленки. $L \times L$ число спинов в каждом слое и N число слоев в тонкой пленке. В данной работе рассматривались системы с линейным размером $L = 32, 48, 64$ и числом слоев в диапазоне от $N = 1$ до $N = 32$. Выбор константы анизотропии для различных размеров пленки осуществлялся пропорционально температуре, соответствующей критической, для пленок Ni(111)/W(110) различной толщины (рис. 4.1). Полученная зависимость изображена на рис. 4.2. Рассматривался температурный интервал

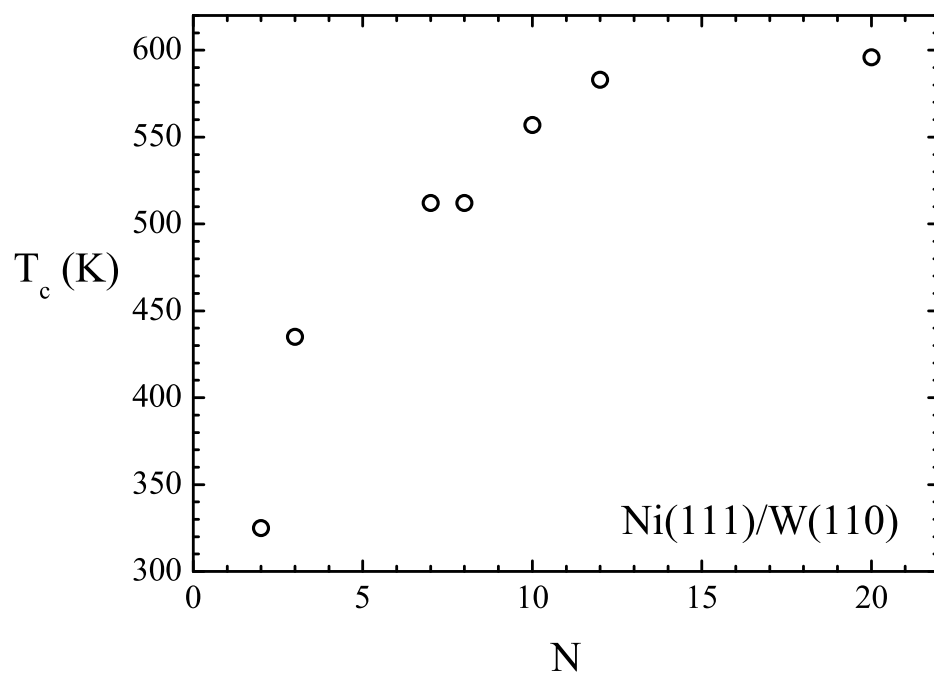


Рис. 4.1: Зависимость критической температуры от толщины пленки [92]

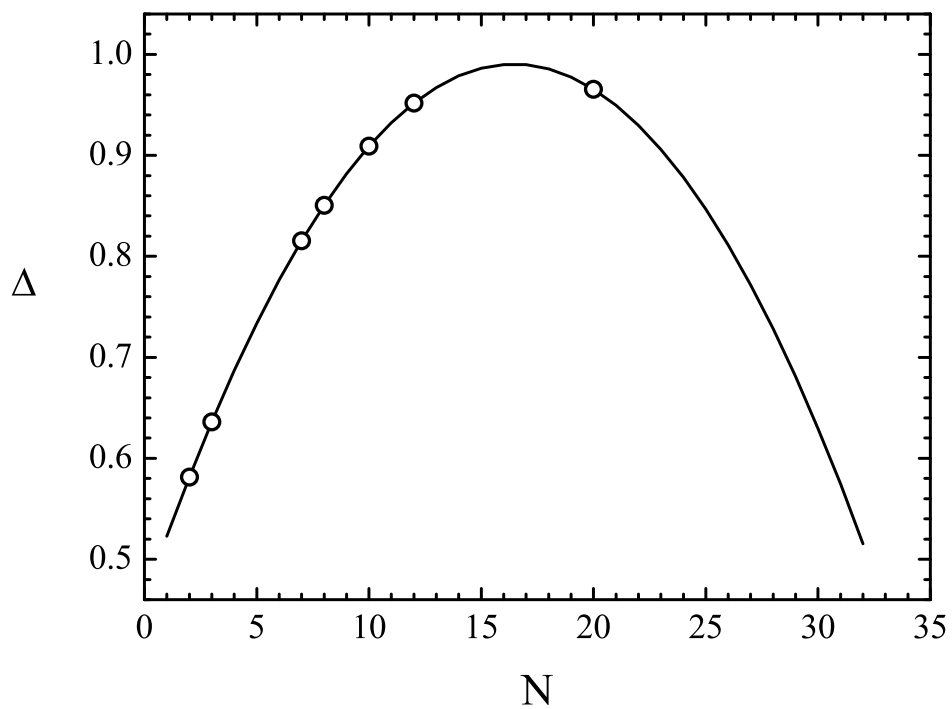


Рис. 4.2: Зависимость константы анизотропии Δ от толщины пленки N

$T = 0.01 - 5.01$ с шагом $T_{\text{step}} = 0.02$. Моделирование начиналось из полностью упорядоченного ферромагнитного состояния.

Для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с использованием алгоритма Свендсена-Ванга [45] были исследованы температурные зависимости намагниченности m

$$m = \left\langle \frac{1}{N_s} \left[\left(\sum_i^{N_s} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^y \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^z \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle, \quad (4.2)$$

ее составляющих: намагниченность ориентированная по нормали к плоскости пленки

$$m_z = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} S_i^z \right\rangle, \quad (4.3)$$

намагниченность в плоскости пленки

$$m_{\parallel} = \left\langle \frac{1}{N_s} \left[\left(\sum_i^{N_s} S_i^x \right)^2 + \left(\sum_i^{N_s} S_i^y \right)^2 \right]^{1/2} \right\rangle, \quad (4.4)$$

и ориентационный параметр порядка [93, 94]

$$O_\alpha = \left\langle \left| \frac{n_h^\alpha - n_v^\alpha}{n_h^\alpha + n_v^\alpha} \right| \right\rangle, \quad (4.5)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение, $\alpha \in \{x, y, z\}$, n_h и n_v число горизонтальных и вертикальных пар ближайших спинов с противоположно направленными S_z ,

$$\begin{aligned} n_h^\alpha &= \sum_{\mathbf{r}} \left\{ 1 - \text{sgn} [S^\alpha(r_x, r_y), S^\alpha(r_x + 1, r_y)] \right\}, \\ n_v^\alpha &= \sum_{\mathbf{r}} \left\{ 1 - \text{sgn} [S^\alpha(r_x, r_y), S^\alpha(r_x, r_y + 1)] \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

На рис. 4.3-4.4 представлены температурные зависимости намагниченности $m(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ для пленок различных размеров. Эти кривые были получены усреднением до 3000 прогонок для каждого значения N .

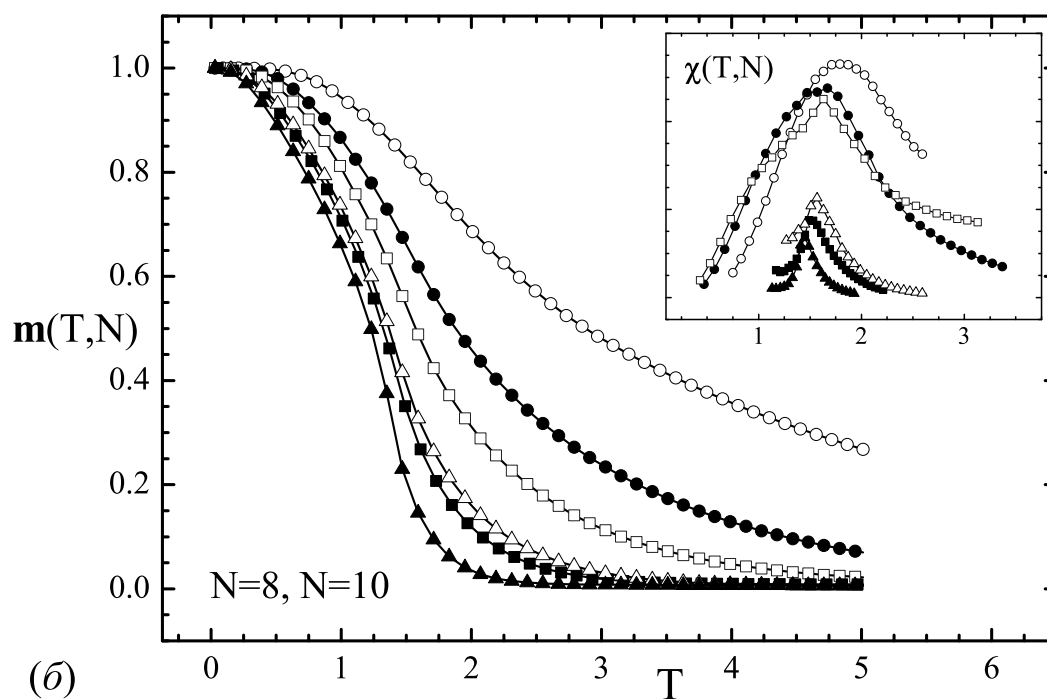
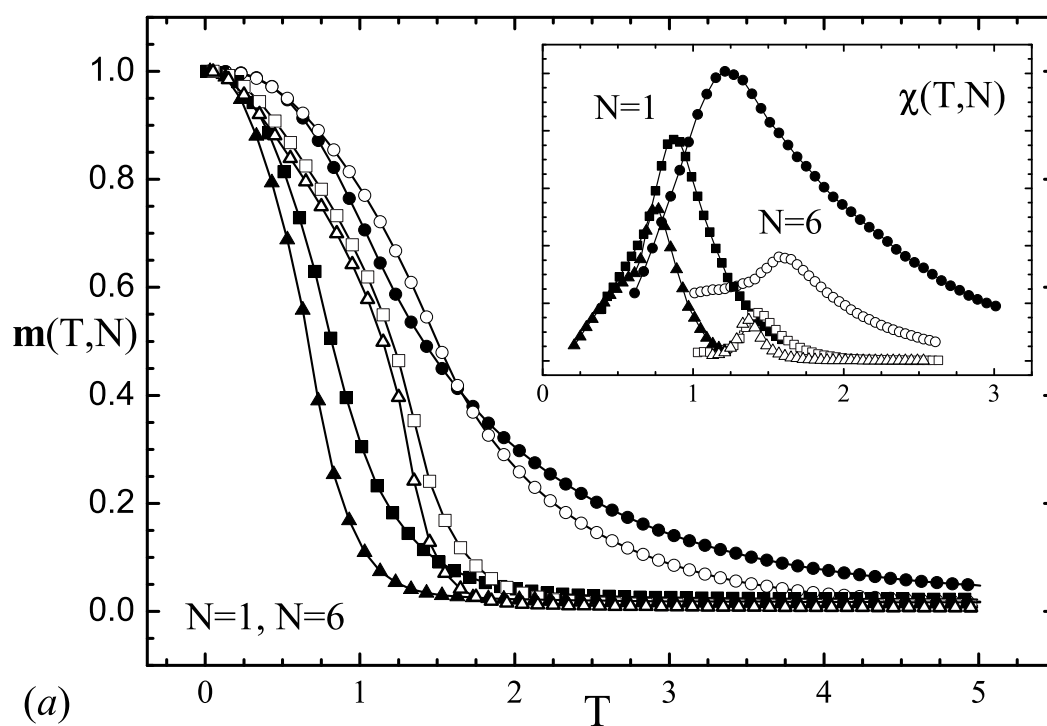


Рис. 4.3: Температурная зависимость намагниченности и восприимчивости тонких пленок различных размеров $N = 1 \div 14$

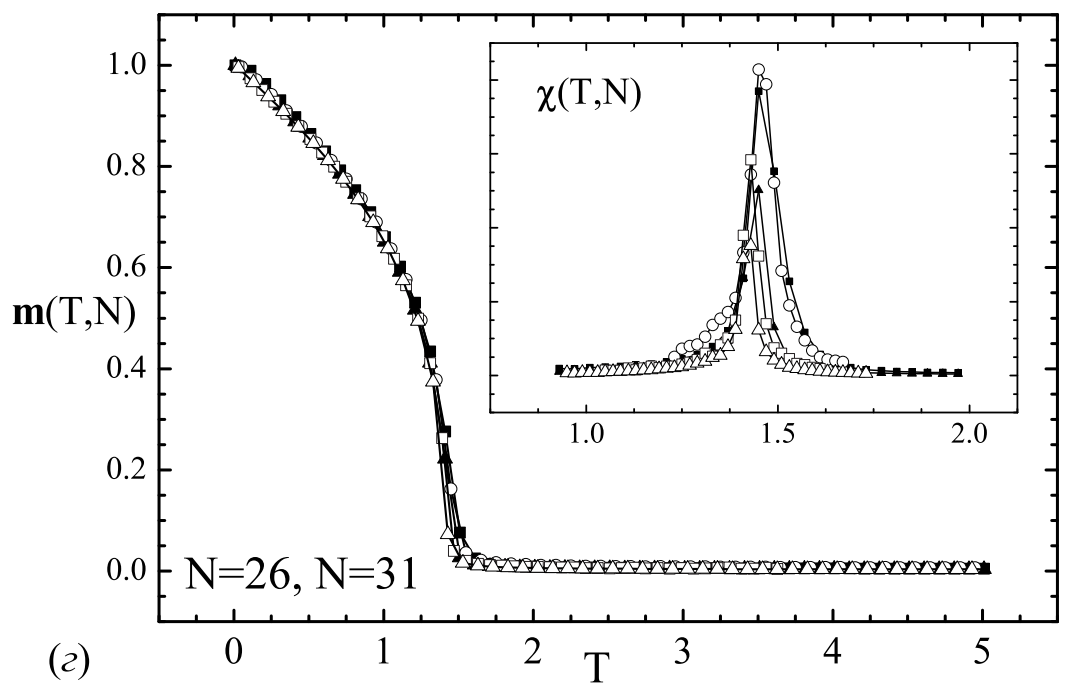
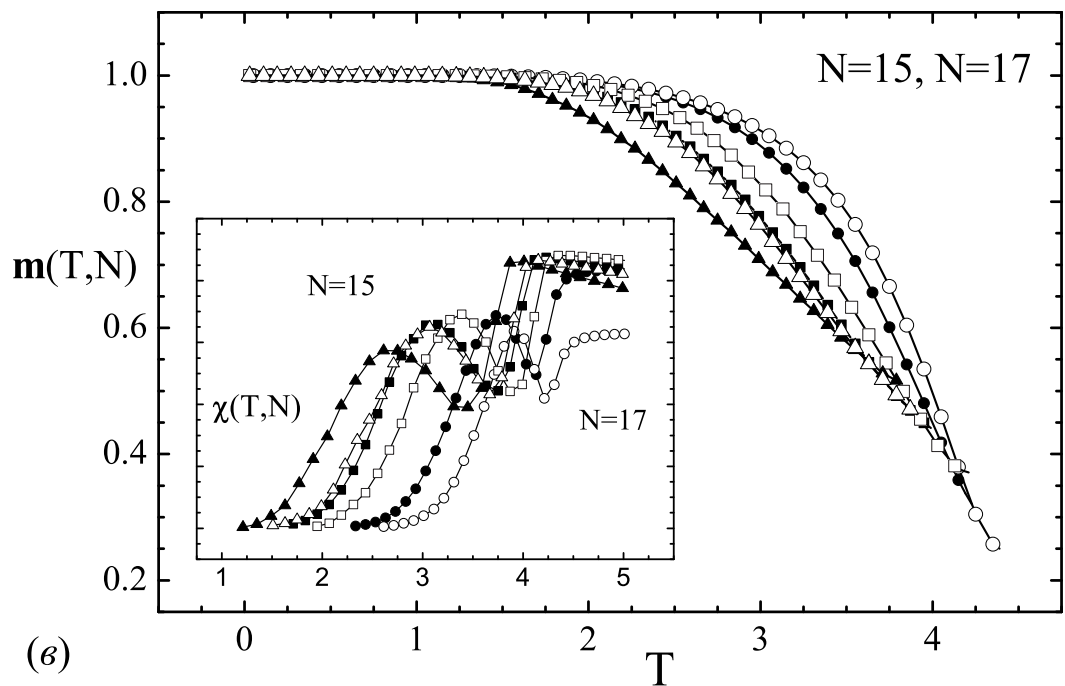


Рис. 4.4: Температурная зависимость намагниченности и восприимчивости тонких пленок различных размеров $N = 15 \div 31$

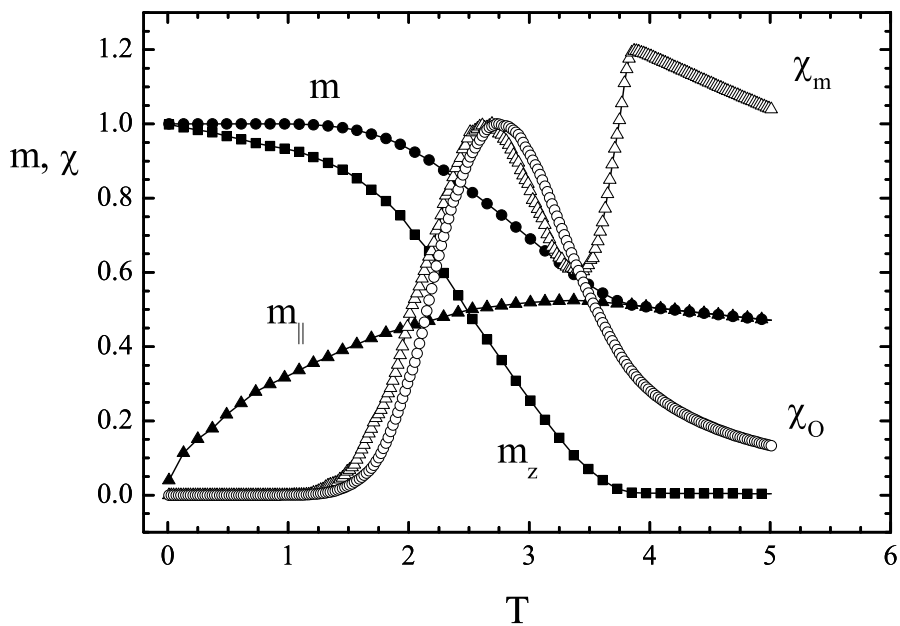


Рис. 4.5: Температурная зависимость намагниченностей m , m_{\parallel} , m_z и восприимчивостей $\chi_m(T)$, $\chi_O(T)$ для тонкой пленки размера $N = 15$ $L = 64$

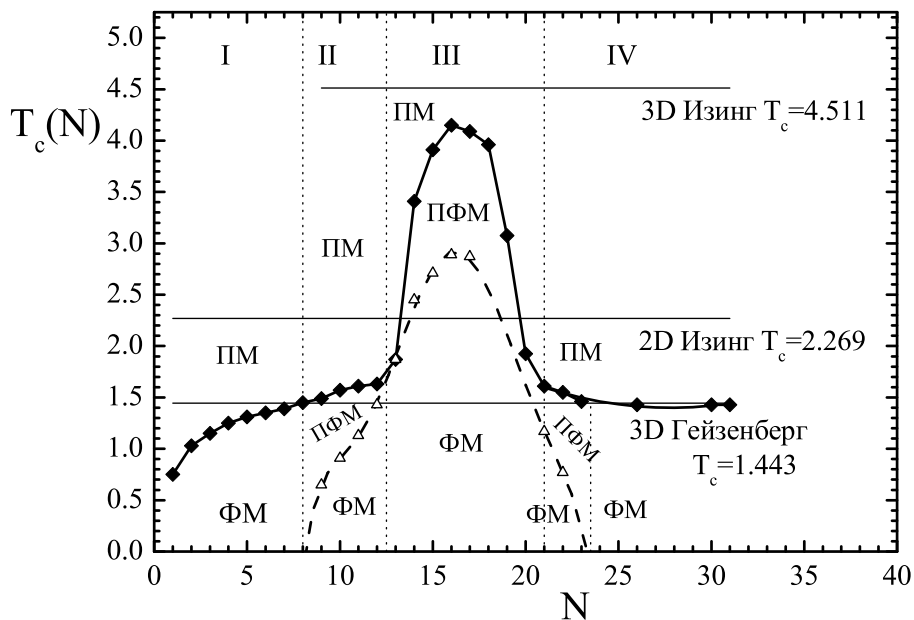


Рис. 4.6: Фазовая диаграмма для тонких пленок (ФМ – ферромагнитная фаза, ПМ – парамагнитная фаза, ПФМ – планарный ферромагнетик)

4.3 Спин ориентационный переход

По положению максимума температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi_m \sim [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2$ могут быть оценены значения критических температур T_c для различных размеров системы.

Для пленок с числом слоев от $N = 9$ до $N = 22$ наблюдается два пика восприимчивости. В данной области был обнаружен спин ориентационный переход (spin reorientation transition - SRT) из фазы, в которой намагниченности выгоднее ориентироваться по нормали к плоскости пленки, в фазу, в которой намагниченность ориентирована вдоль пленки. В экспериментальных [95] и теоретических работах [96], посвященных исследованию однослойных магнетиков, предсказывается, что данный переход является слабым переходом первого рода.

В температурной области спин ориентационного перехода, соответствующей первому пику, были более детально исследованы зависимости намагниченности $m_{||}$ и m_z , а также ориентационного параметра порядка (4.5). Температурные зависимости намагниченностей $m(T)$, $m_{||}(T)$, $m_z(T)$ и восприимчивостей $\chi_m(T)$, $\chi_O(T) \sim [\langle O_z^2 \rangle] - [\langle O_z \rangle]^2$ представлены на рис. 4.5. Первый пик $\chi_m(T)$ соответствует спин ориентационному переходу и при $T = 2.71$ наблюдается спад намагниченности ориентированной по нормали к плоскости пленки. Второй пик при $T = 3.91$ соответствует фазовому переходу второго рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость кумулянта Биндера 4-го порядка $U_4(L, T)$ были уточнены значения температур фазового перехода второго рода из ферромагнитного состояния в парамагнитное.

Зависимость критической температуры от толщины пленки представлена в таб. 4.1, для толщин от $N = 2$ до $N = 31$. ФМ-ПМ – фазовый переход второго рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную, ФМ-ПФМ – спин ориентационный переход из ферромагнитной фазы в фазу планарного магнетика. На рис. 4.6 приведены значения критических температур для различных размеров пленок. Сплошная линия соответствует переходу из ферромагнитного состояния в парамагнитное, пунктирная линия соответствует спин ориентационному переходу.

Таблица 4.1: Зависимость критической температуры $T_c(N)$ от толщины пленки

N	ФМ-ПФМ	ФМ-ПМ	N	ФМ-ПФМ	ФМ-ПМ
2	-	1.03(8)	13	1.87(7)	1.87(12)
3	-	1.15(11)	14	2.45(9)	3.41(13)
4	-	1.25(5)	15	2.71(7)	3.91(20)
5	-	1.31(10)	16	2.89(8)	4.15(14)
6	-	1.35(4)	17	2.87(15)	4.09(15)
7	-	1.39(4)	21	1.17(3)	1.61(15)
8	0	1.45(8)	22	0.77(3)	1.55(14)
9	0.65(2)	1.49(10)	23	0	1.46(8)
10	0.91(4)	1.57(8)	26	-	1.43(10)
11	1.13(3)	1.61(15)	30	-	1.43(6)
12	1.43(6)	1.63(11)	31	-	1.43(5)

4.4 Размерные эффекты в критическом поведении тонких пленок

Рассматривалась конечно-размерная скейлинговая форма для пленок [97, 98] для того, чтобы найти как m и χ зависят от линейного размера L и толщины N системы, которые позволяют определить эффективные критические показатели из полученных температурных величин.

$$\begin{aligned}\langle m(T, N) \rangle &= L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu} \tau, N) \\ \chi(T, N) &= L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \tau, N)\end{aligned}\quad (4.7)$$

где γ , β и ν эффективные критические индексы восприимчивости χ , намагниченности m и корреляционной длины ξ , соответственно. Для монослойных пленок $N = 1$ эффективные показатели совпадают с критическими индексами двумерных систем. Функции $\tilde{\chi}$ и \tilde{m} скейлинговые функции от заданных значений N и приведенной температуры $\tau = T/T_c - 1$.

В критической области при $T \rightarrow T_c$ кумулянт Биндера U_4 характеризуется скейлинговой формой

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{1/\nu} \quad (4.8)$$

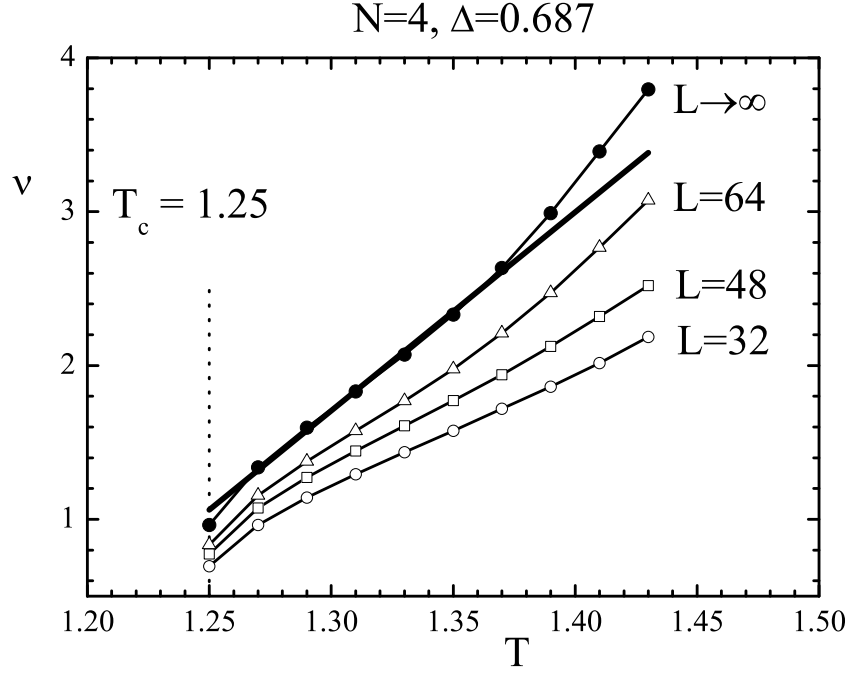


Рис. 4.7: Температурная зависимость критического индекса $\nu(T, L)$

и, следовательно, по максимальному наклону кумулянтов вблизи точки их пересечения при $L \rightarrow \infty$ можно определить значение критического индекса ν . Используя данное выражение, были получены значения критического индекса ν для различных линейных размеров решетки и для различных значений температур выше критической.

На рис. 4.7 представлена зависимость критического индекса ν от температуры для различных линейных размеров решетки. Эффективное значение критического индекса ν может быть получено только в термодинамическом пределе. С использованием линейной аппроксимации $L \rightarrow \infty$ и $T \rightarrow T_c$ для пленок с толщиной от $N = 2$ до $N = 6$ были получены следующие значения индексов $\nu(N = 2) = 1.021(18)$, $\nu(N = 3) = 1.011(27)$, $\nu(N = 4) = 1.018(14)$, $\nu(N = 5) = 0.972(59)$, $\nu(N = 6) = 0.974(62)$. Эти значения близки к значениям для двумерной модели Изинга. На рис. 4.8 представлена скейлинговая зависимость $f(m) = L^{\beta/\nu} m$ как функция $L^{1/\nu}(T_c - T)/T_c$. Данные зависимости, рассчитанные для пленок с толщиной от 2 до 5 слоев с линейным размером $L = 32, 48, 64$, ложатся на одну кривую и демонстриру-

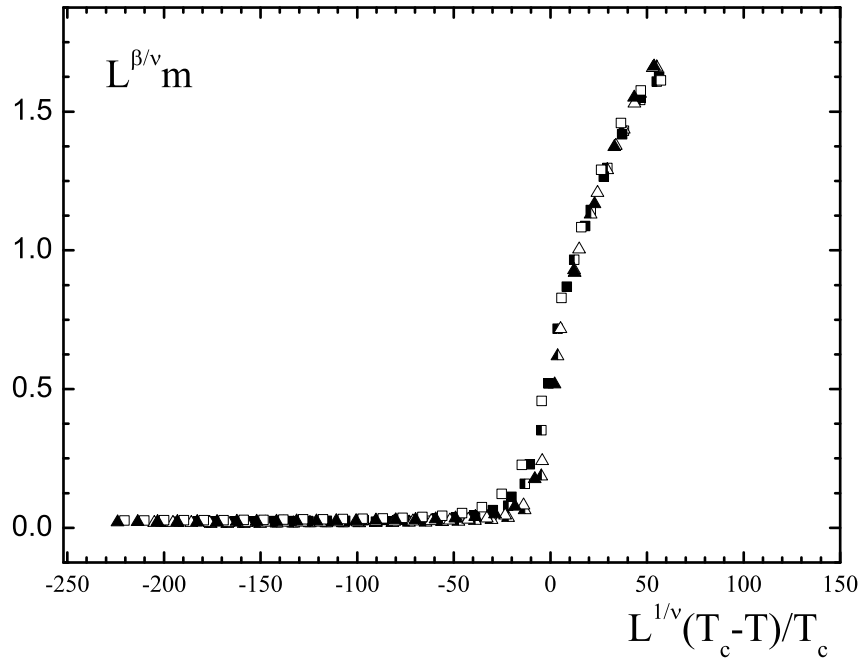


Рис. 4.8: Скейлинговая зависимость $f(m) = L^{\beta/\nu} m$ от $L^{1/\nu}(T_c - T)/T_c$

ют правильность вычисления эффективных значений критических индексов. Первое исследование ферромагнитных свойств двумерной модели Изинга было выполнено Пайерлсом [99] и развито Крамерсом и

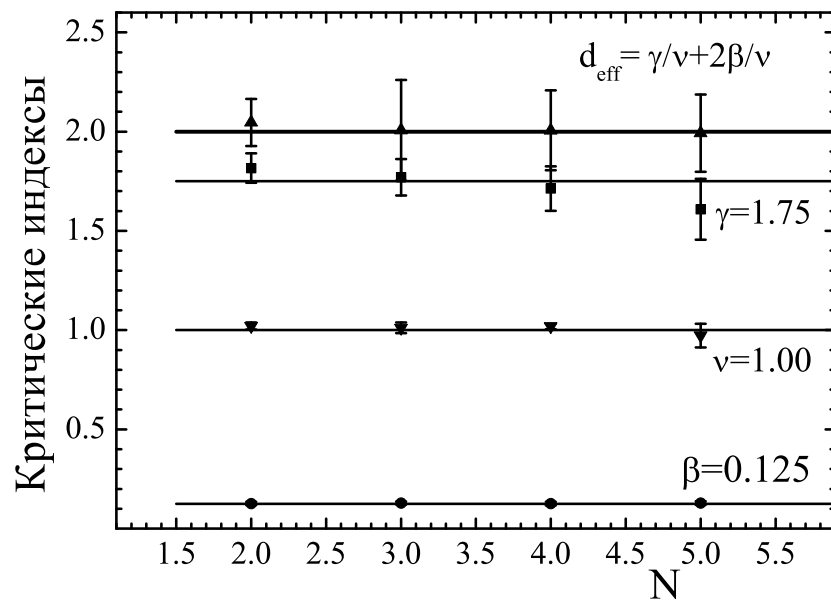


Рис. 4.9: Значения критических индексов ν , β , γ и эффективной размерности d_{eff}

Ванье [100]. Была точно определена температура фазового перехода $kT_c/J = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) = 2.269$, где k – константа Больцмана. Онсагером [101] было получено точное решение задачи о фазовом переходе в двухмерной модели Изинга. Были получены следующие значения критических индексов $\beta = 1/8$, $\nu = 1$, $\gamma = 7/4$, $\alpha = 0$.

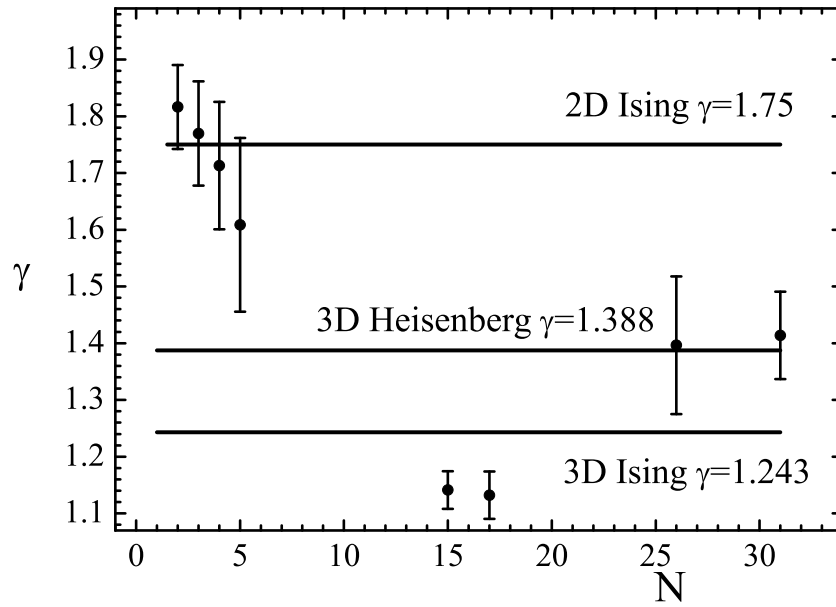


Рис. 4.10: Зависимость критического индекса γ от толщины пленки N

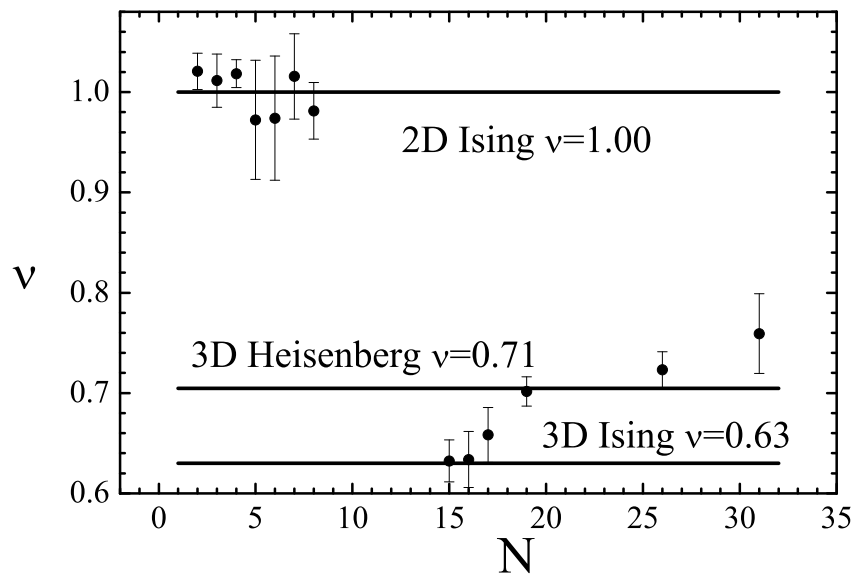


Рис. 4.11: Зависимость критического индекса ν от толщины пленки N

Таблица 4.2: Значения критических индексов ν , β , γ и эффективной размерности d_{eff}

N	ν	β	γ	d_{eff}
2	1.021(18)	0.126(8)	1.816(69)	2.046(59)
3	1.011(27)	0.128(8)	1.770(94)	2.007(125)
4	1.018(14)	0.126(9)	1.713(112)	2.007(101)
5	0.972(59)	0.129(9)	1.609(150)	1.992(98)

Значения критических показателей β/ν и γ/ν могут быть определены через угол наклона кривых, построенных в двойном логарифмическом масштабе и определяющих зависимость намагниченности m и восприимчивости χ от L при критической температуре T_c

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad \chi \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (4.9)$$

Основываясь на гиперскейлинговом соотношении $\gamma/\nu + 2\beta/\nu = d$, можно найти эффективную размерность d_{eff} . Для $N/L \ll 1$ ожидается критическое поведение квазидвумерных систем, то есть d_{eff} должно быть близко к 2.

Была рассчитана эффективная размерность $d_{\text{eff}} = \gamma/\nu + 2\beta/\nu$. Было выявлено, что для пленок с толщиной $N = 2 - 5$, d_{eff} принимает значение близкое к 2. Данные значения вместе с погрешностями приведены на рис. 4.9.

В исследованиях, посвященным тонким пленкам [22], экспериментально наблюдается переход от двумерных к трехмерным критическим свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки (рис. 4.12). В данной главе диссертации была получена температурная зависимость намагниченности вблизи критической точки $m \sim (T_c - T)^\beta$, из которой были определены значения критического индекса β для различных размеров системы. Представленные на рис. 4.13 данные наглядно демонстрируют размерный переход от поведения двумерной модели Изинга к поведению трехмерной модели Гейзенберга с ростом толщины пленки.

Константа анизотропии принимает наибольшие значения, близкие к 1, для пленок с толщиной $N = 15 - 17$. Критическое поведение таких

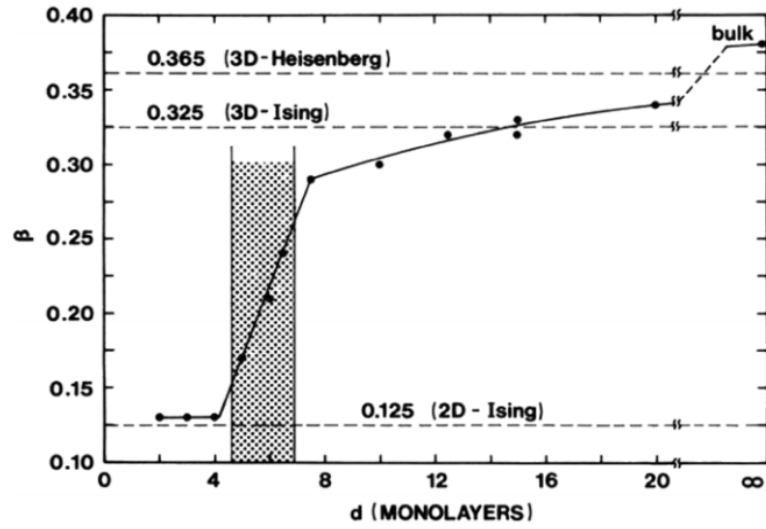


Рис. 4.12: Зависимость показателя β от толщины пленки $Ni(111)/W(110)$ [92]

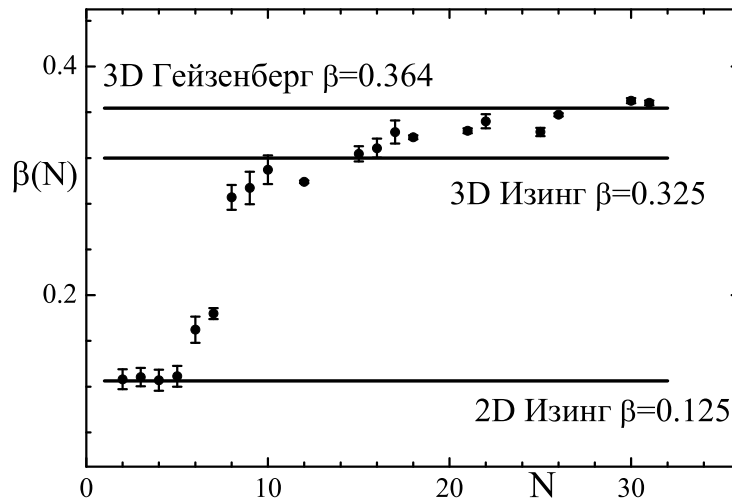


Рис. 4.13: Зависимость критического индекса β от толщины пленки N

систем соответствует критическому поведению трехмерной модели Изинга. Однако для этих пленок можно выделить дополнительный температурный интервал на котором система демонстрирует критические свойства двумерной модели Изинга. На рис. 4.14 представлена зависимость намагниченности от приведенной температуры для пленок с размером $L = 64$, $N = 15, 17$. Система характеризуется критическими индексами $\beta(L = 64) = 0.319(3)$ для $N = 15$ и $\beta(L = 64) = 0.337(3)$ для $N = 17$, что соответствует значению критического индекса намагниченности для трехмерной модели Изинга $\beta = 0.325$ [71]. По мере приближения к кри-

Таблица 4.3: Значения критического индекса β намагниченности для различных толщин пленки

N	β	N	β	N	β
2	0.126(9)	9	0.294(14)	18	0.338(2)
3	0.128(8)	10	0.310(13)	21	0.344(2)
4	0.126(9)	12	0.299(11)	22	0.352(6)
5	0.129(9)	13	0.314(5)	25	0.343(4)
6	0.170(11)	15	0.324(7)	26	0.358(1)
7	0.184(5)	16	0.329(8)	30	0.370(2)
8	0.286(11)	17	0.343(10)	31	0.368(2)

тической точке корреляционная длина растет во всех направлениях и демонстрирует поведение трехмерных систем, достигает границ образца и продолжает расти только вдоль плоскости пленки и таким образом демонстрирует критическое поведение двумерных систем. Критические индексы $\beta(L = 64) = 0.124(5)$ для $N = 15$ и $\beta(L = 64) = 0.127(7)$ для $N = 17$ близки к значениям для двумерной модели Изинга $\beta = 0.125$.

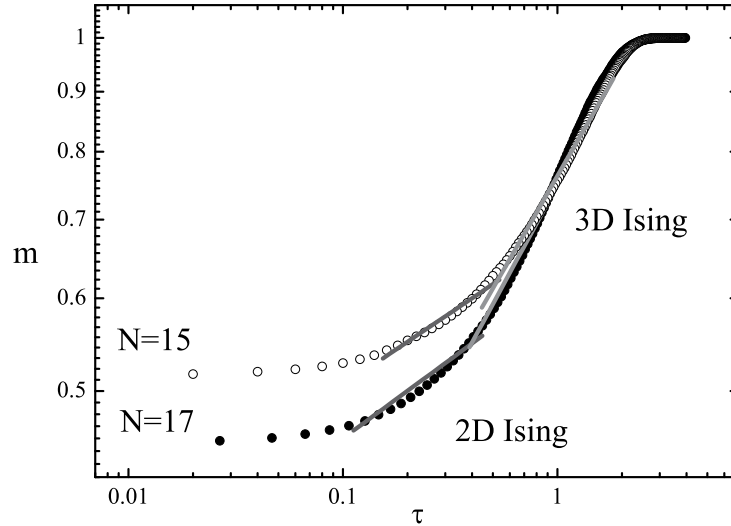


Рис. 4.14: Зависимость намагниченности от приведенной температуры $\tau = (T_c - T)/T_c$

4.5 Основные результаты и выводы

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. Исследовано критическое поведение тонких магнитных пленок на основе анизотропной модели Гейзенберга. Выявлены размерные эффекты в поведении намагниченности и магнитной восприимчивости.
2. Рассчитаны температуры фазового перехода второго рода для пленок различной толщины. Обнаружен спин ориентационный переход в системах с толщиной от $N = 9$ до $N = 22$ слоев.
3. Рассчитаны критические индексы β , ν , γ для различных толщин пленки. Критическое поведение тонких пленок с толщиной $N \leq 5$, соответствует поведению двумерной модели Изинга. Критическое поведение пленок с $6 \leq N \leq 12$ соответствует кроссоверной области от двумерных свойств к трехмерным. Для пленок с толщиной от $N = 13$ до $N = 21$ критический индекс β соответствует трехмерной модели Изинга. Для пленок с толщиной $N > 21$ система демонстрирует критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга. Впервые выявлен переход от двумерных к трехмерным свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

Заключение

Основные результаты и выводы:

1. Разработана методика численного исследования неравновесного критического поведения структурно неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с дальней пространственной корреляцией дефектов в коротковременном режиме и методика определения значений универсальных критических показателей с учетом ведущих поправок к скейлингу.

2. Осуществлено компьютерное моделирование трехмерной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов различной концентрации. Были исследованы равновесные характеристики слабо ($p = 0.8$) и сильно ($p = 0.6$) неупорядоченной модели и были рассчитаны значения критических температур $T_c(p = 0.8) = 1.197(2)$ и $T_c(p = 0.6) = 0.888(5)$.

3. С использованием метода коротковременной динамики была исследована критическая релаксация трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами из различных начальных состояний. Для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией $p = 0.8$ были получены значения динамических и статических критических индексов $z = 2.257(61)$, $\beta = 0.393(77)$, $\nu = 0.770(74)$, $\omega = 0.786(45)$. Данные значения в пределах погрешностей находятся в хорошем согласии с теоретическими результатами.

4. Впервые было получено численное подтверждение о существовании влияния дальней пространственной корреляции дефектов на критическое поведение систем с трехкомпонентным параметром порядка. Для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с концентрацией спинов $p = 0.6$ были получены значения статических критических индексов $\nu = 0.821(14)$, $\beta = 0.946(48)$ и динамического критического индекса $z = 3.529(125)$. Более высокое значение динамического критического

индекса демонстрирует, что сильно неупорядоченная модель Гейзенберга характеризуется более медленной динамикой.

5. Показано, что слабо и сильно неупорядоченные модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов принадлежат к разным классам универсальности.

6. Исследовано критическое поведение тонких магнитных пленок на основе анизотропной модели Гейзенберга. Выявлены размерные эффекты в поведении намагниченности и магнитной восприимчивости. Критическое поведение тонких пленок с толщиной $N \leq 5$, соответствует поведению двумерной модели Изинга. Критическое поведение пленок с $6 \leq N \leq 12$ соответствует кроссоверной области от двумерных свойств к трехмерным. Для пленок с толщиной от $N = 13$ до $N = 21$ критический индекс β соответствует трехмерной модели Изинга. Для пленок с толщиной $N > 21$ система демонстрирует критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга. Впервые выявлен переход от двумерных к трехмерным свойствам многослойных магнетиков с ростом толщины пленки.

Литература

- [1] Amit D. Field theory, the renormalization group, and critical phenomena. New York:McGraw-Hill, 1978. – 394p.
- [2] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.:Наука, 1982. – 382с.
- [3] Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.:Мир, 1980. – 298с.
- [4] Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком. // УФН. – 1993. – Т. 165. – Вып. 5. – С. 481-528.
- [5] Blavats'ka V., C. von Ferber and Holovatch Yu. Polymers in long-range-correlated disorder // Phys. Rev. E. - 2001. - V. 64. - P. 041102.
- [6] C. Vásquez R., R. Paredes V., Hasmy A., Julien R. New Universality Class for the Three-Dimensional XY Model with Correlated Impurities: Application to ^4He in Aerogels // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 90. – P. 170602.
- [7] Binder K., Reger J.D. Theory of orientational glasses. Models, concepts, simulations // Adv. Phys. – 1992. - V. 41. - P. 547-627.
- [8] Korzhenevskii A.L., Luzhkov A.A., Schirmacher W. Critical behavior of crystals with long-range correlations caused by point defects with degenerate internal degrees of freedom // Phys.Rev. B. – 1998. – V. 50. – P. 3661.
- [9] Altarelli M., Nunez-Regueiro M. D. and Papoular M. Coexistence of Two Length Scales in X-Ray and Neutron Critical Scattering: A Theoretical Interpretation // Phys. Rev. Lett. – 1995. – V. 74. – P. 3840.

- [10] Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P. Static critical behavior of three dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 48. – P. 3249-3256.
- [11] Birgeneau R.J., Skalyo J., Shirane Jr., Shirane G. Phase Transitions and Magnetic Correlations in Two-Dimensional Antiferromagnets // *J. Appl. Phys.* – 1970. – V. 41. – P. 1303.
- [12] Regnault L.P., Rossat-Mignod J. Phase transitions in quasi two-dimensional planar magnets. *Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds.* Ed. De Jongh L. J. Kluwer Academic Publishers. 1990. P. 271-321.
- [13] Regault L.P., Henry J.Y. Rossat-Mignod J. and De Combarieu A. Magnetic properties of the layered nickel compounds $\text{BaNi}_2(\text{PO}_4)_2$ and $\text{BaNi}_2(\text{AsO}_4)_2$ // *JMMM.* – 1980. – V. 15. – P. 1021-1022.
- [14] Wiesler D.G. and Zabel H. Two-dimensional ferromagnetic correlations in CoCl_2 -intercalated graphite // *Phys. Rev. B.* – 1987. – V. 36. – P. 7303.
- [15] Castro L.M., Plascak J.A., and Pires A.S.T. Low-temperature thermodynamic study of the diluted planar rotator model using a self-consistent harmonic approximation // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2002. – V. 248. – P. 62.
- [16] Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А. Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения неупорядоченных систем // *Письма в ЖЭТФ.* – 2013. – V. 98. – P. 670.
- [17] Calabrese P., Gambassi A. Ageing properties of critical systems // *J. Phys. A: math. Gen.* - 2005. - V. 38. - P. 133-193.
- [18] Yin J.Q., Zheng B., Prudnikov V.V., Trimper S. Short-time dynamics and critical behavior of three-dimensional bond-diluted Potts model // *Eur. Phys. J. B.* – 2006. – V. 49. – P. 195.

- [19] Weinrib A., Halperin B.I. Critical phenomena in system with long-range-correlated quenched disorder // *Phys. Rev. B.* – 1983. – V. 27. – P. 413-427.
- [20] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V. and Fedorenko A.A. Field-theory approach to critical behaviour of systems with long-range correlated defects // *Phys. Rev. B.* - 2000. - V. 62. - P. 8777-8786.
- [21] Chappert C., Fert A., Nguyen van Dau F. The emergence of spin electronics in data storage // *Nature Mater.* - 2007. - V. 6. - P. 813-822.
- [22] Vaz C.A.F., Bland J.A.C., Lauhoff G. Magnetism in ultrathin film structures // *Rep. Prog. Phys.* - 2008. - V. 71. - P. 056501.
- [23] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. – Ч. 1. – 584с.
- [24] Соколов А.И. Критические флуктуации и ренормализационная группа // *Соросовский образовательный журнал.* – 2000. – Т. 6. – Вып. 12. – С. 98-103.
- [25] Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // *УФН.* – 2003. – Т. 173. – Вып. 2. – С. 175-200.
- [26] Fisher M.E. Renormalization of critical exponents by hidden variables // *Phys. Rev.* – 1986. – V. 176. – N. 1. – P. 257-272.
- [27] Хмельницкий Д.Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах // *ЖЭТФ.* - 1975. - Т. 68, вып. 5. - С. 1960-1968.
- [28] Дороговцев С.Н. Критические свойства магнетиков с дислокациями и точечными примесями // *ЖЭТФ.* – 1981. – Т. 80. N 5. –С. 2053-2067.
- [29] Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys. C.* – 1974. – V. 7. – N 6. – P. 1671-1692.

- [30] Guida R., Zinn-Justin J. Critical exponents of the N-vector model // J. Phys. A: Math. Gen. - 1998. - V. 31. - P.8103.
- [31] Lipa J.A., Nissen J.A., Striker D.A., Swanson D.R., Chul T.C.P. Specific heat of liquid helium in zero gravity very near the lambda point // Phys. Rev. B. - 2003. - V. 68. - P.174518.
- [32] LeGuillou C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // Phys. Rev. B. - 1980. - V. 21. - P.3976.
- [33] Boyanovsky D., Cardy J.L. Critical behavior of m -component magnets with correlated impurities // Phys. Rev. B. - 1982. - V. 26. - N 1. - P. 154-170.
- [34] Birgeneau R.J., Cowley R.A., Shirane G., Yoshizawa H., Belanger D.P., King A.R., Jaccarino V. Critical behaviour of site-diluted three dimensional Ising magnet // Phys. Rev. B. - 1983. - V. 27. - P. 6747-6757.
- [35] Thurston T.R., Peter C.J., Birgeneau R.J., Horn P.M. Synchrotron magnetic x-ray measurements of the order parameter in $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ // Phys. Rev. B. - 1988. - V. 37. - P. 9559-9563.
- [36] Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. Омск: ОмГУ, 2007. – 288с.
- [37] Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990. – Ч. 2. – 399с.
- [38] Janke W. Monte Carlo Methods in Classical Statistical Physics / Computational Many-Particle Physics. - Springer Berlin Heidelberg, 2008. - P. 79-140.
- [39] Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 224с.

- [40] Аплеснин С.С. Исследование магнитных свойств слабовазаимодействующих антиферромагнитных цепочек с альтернированным обменным взаимодействием со спином $S = 1/2$ при помощи квантового метода МонтеКарло // ЖЭТФ. - 2000. - Т.117, вып. 1. - С.218-226.
- [41] Barash L.Yu., Shchur L.N. RNGSSELIB: Program library for random number generation, SSE2 realization // Comput. Phys. Commun. - 2011. - V. 182. - P. 1518-1527.
- [42] Щур Л.Н. Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний // УФН. - 2012. - Т. 182. - С. 787-792.
- [43] Бараш Л.Ю., Щур Л.Н. Генерация случайных чисел и параллельных потоков случайных чисел для расчетов Монте-Карло // Модел. и анализ информ. систем. - 2012. - Т. 182. - С. 145-162.
- [44] Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // Journal of Chemical Physics. - 1953. - V. 21. - P. 1087-1092.
- [45] Swendsen R.H., Wang J.-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // Phys. Rev. Lett. - 1987. - V. 58. - P. 86-88.
- [46] Wolf U. Collective Monte Carlo updating for spin systems // Phys. Rev. Lett. - 1989. - V. 62. - P. 361-364.
- [47] Hohenberg P.C., Halperin B.I. Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Mod. Phys. - 1977. - V. 49. - P. 435.
- [48] Parisi G., Ricci-Tersenghi F., Ruiz-Lorenzo J.J. Universality in the offequilibrium critical dynamics of the three-dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. E. - 1999. - V. 60. - P. 5191 - 5198.
- [49] Hasenbach M., Pelissetto A., Vicari E. Relaxation dynamics in 3D randomly diluted Ising models // J. Stat. Mech.: Theory Exp. - 2007. - P. 11009.
- [50] Rosov N., Hohenemser C., Eibschutz M. Dynamic critical behavior of the random-exchange Ising system $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$ determined via Mössbauer spectroscopy // Phys. Rev. B. - 1992 - V. 46. - P. 3452.

- [51] Криницие А.С., Прудников В. В., Прудников П. В. Расчет динамического критического индекса методом суммирования асимптотических рядов // ТМФ. - 2006. - Т. 147. - С. 137-154.
- [52] Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes // Z. Phys. B. – 1989. – V. 73. – P. 539-549.
- [53] Li Z., Schülke L., Zheng B. Finite Size Scaling and Critical Exponents in Critical Relaxation // Phys. Rev. E. - 1996. - V. 53. - P. 2940.
- [54] Schülke L., Zheng B. Determination of the Critical Point and Exponents from short-time Dynamics // Phys. Lett. A. - 1996. - V. 215. - P. 81-85.
- [55] Ballesteros H.G., Fernandez L.A., Martin-Mayor V., Munoz Sudupe A. Critical exponents of the three dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. B. - 1998. - V. 58. - P. 2740-2747.
- [56] Calabrese P., Martin-Mayor V., Pelissetto A., Vicari E. The three-dimensional randomly dilute Ising model: Monte Carlo results // Phys. Rev. E. - 2003. V. 68. - P. 036136.
- [57] Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н., Криницин А.С. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга // ЖЭТФ. - 2007. - Т. 132, вып. 2. - С. 417-425.
- [58] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Zheng B., Dorofeev S.V., Kolesnikov V.Y. Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with longrange correlated disorder // Progr. Theor. Phys. - 2007. - V. 117. - P. 973-991.
- [59] Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. Non-Equilibrium Critical Relaxation of the 3D Heisenberg magnets with Long-Range Correlated Disorder // Progr. Theor. Phys. - 2012. - V. 127. - P. 369.
- [60] Albano E.V., Bab M.A., Baglietto G., Borzi R.A., T. S. Grigera, E. S. Loscar, D. E. Rodriguez, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco. Study

- of phase transitions from short-time non-equilibrium behaviour // Rep. Prog. Phys. – 2011. – V. 74. – P. 026501.
- [61] Ozeki Y. and Ito N. Nonequilibrium relaxation method // J. of Phys. A. – 2007. – V. 40. – P. R149.
- [62] R. da Silva, Alves N.A. and Drugowich de Felício J. R. Mixed initial conditions to estimate the dynamic critical exponent in short-time Monte Carlo simulation // Phys. Lett. A. – 2002. – V. 298. – P. 325-329.
- [63] Ballesteros H.G., Fernández L.A., Martín-Mayor V., Muñoz Sudupe. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58. – N 5. – P. 2740-2747.
- [64] Cooper F., Freedman B., Preston D. Solving $\phi_{1,2}^4$ field theory with Monte Carlo // Nucl. Phys. B. – 1989. – V. 210. – P. 210.
- [65] Ballesteros H. G., Fernández L. A., Martín-Mayor V., Muñoz Sudupe. New universality class in three dimensions: the antiferromagnetic RP^2 model // Phys. Lett. B. – 1996. – V. 378. – P. 207; – 1996. – V. 387. – P. 125.; Nucl. Phys. B. – 1997. – V. 483. – P. 707.
- [66] Прудников П.В., Яковлев М.И., Бакланов А.В., Воронина А.О., Горохова О.В. Теоретический расчет критических характеристик неупорядоченной системы с дальнедействующей корреляцией дефектов // Вестник Омского Университета. - 2010. - Т. 2. - С. 62.
- [67] Fernandes H.A., Roberto da Silva, J.R. Drugowich de Felício. Short-time critical and coarsening dynamics of the classical three-dimensional Heisenberg model // J. Stat. Mech. - 2006. - V. 10. - P. 10002.
- [68] Qin X.P., Zheng B. and Zhou N.J. Universality class of the depinning transition in the two-dimensional Ising model with quenched disorder // J. Phys. A: Math. Theor. – 2012. – V. 45. – P. 115001.
- [69] Janssen H.K. From Phase Transitions to Chaos, edited by Gyorgyi G., Kondor I., Sasvari L., and Tel T., *Topics in Modern Statistical Physics*. – Singapore: World Scientific, 1992. – 589p.

- [70] Perumal A., Srinivas V., Rao V.V., Dunlap R.A. Quenched Disorder and the Critical Behavior of a Partially Frustrated System // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 91. – P. 137202.
- [71] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Krinitsyn A.S. et. al. Short-time dynamics and critical behavior of the three-dimensional site-diluted Ising model // Phys. Rev. E. – 2010. – V. 81. – P. 011130.
- [72] Прудников П.В., Прудников В.В., Колесников В.Ю., Медведева М.А., Желтышев П.А. Численное исследование влияния протяженных дефектов структуры на критическое поведение трехмерных систем методом коротковременной динамики, *Труды Семинара по вычислительным технологиям в естественных науках*. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р. Р. Назирова. — М.: Изд-во КДУ, 2009. — С. 264-278.
- [73] Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке // УФН. – 2008. – V. 178. N9 – P. 1001.
- [74] Murtazaev A.K. and Ramazanov M.K. Critical properties of the three-dimensional frustrated Heisenberg model on a layered-triangular lattice with variable interplane exchange interaction // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 174421.
- [75] Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. М.: Мир, 1981. – 426с.
- [76] Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Phys. Rev. B. - 1976. - V. 14. - P. 3438.
- [77] Прудников П.В., Медведева М.А. Неравновесное критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнедействующей корреляцией дефектов // ФНТ. - 2014. - Т. 40.- Вып. 5.
- [78] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Bo Zcheng, Dorofeev S.V., Kolesnikov V.Yu. Short-time critical dynamics of the three-dimensional

- system with long-range correlated disorder // Progress of theoretical physics. – 2007. – V. 117. – N 6. – P. 973-991.
- [79] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Dorofeev S.V., Kolesnikov V.Yu. Monte Carlo studies of critical behaviour of systems with long-range correlated disorder // Condensed Matter Physics. – 2005. – V. 8. – N 1(41). – P. 213-224.
- [80] Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Kalashnikov I.A. and Tsirkin S.S. Renormalization-group description of nonequilibrium critical short-time relaxation processes: A three-loop approximation // JETP. – 2008. – V. 106. – P. 1095-1101.
- [81] Calabrese P., Gambiassi A., Krzakala F. Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // J. Stat. mech. - 2006. - P. 06016.
- [82] Прудников П.В., Медведева М.А., Шакирзянов Ф.Р. Численное исследование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных систем с протяженными дефектами структуры вблизи температуры фазового перехода второго рода. // Известия Казанского государственного архитектурно-строительного университета. - 2012. – Вып. 3 (21). – С. 209 - 215. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. – Ч. 1. – 584с.
- [83] Bland J.A.C. and Heinrich B. Ultrathin Magnetic Structures: I. Berlin: Springer, 1994.
- [84] Heinrich B. and Bland J.A.C. Ultrathin Magnetic Structures: II. Berlin: Springer, 1994.
- [85] Bland J.A.C. and Heinrich B. Ultrathin Magnetic Structures: III. Berlin: Springer, 2005.
- [86] Heinrich B. and Bland J.A.C. Ultrathin Magnetic Structures: IV. Berlin: Springer, 2005
- [87] Baibich M. N., Broto J. M., Fert A., Nguyen Van Dau F., Petroff F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A. and Chazelas J. Giant

- Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices // Phys. Rev. Lett. - 1988. - V. 61. - P. 2472.
- [88] Binasch G., Grünberg P., Saurenbach F. and Zinn W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange // Phys. Rev. B. - 1989. - V. 39. - P. 4828.
- [89] Rottmayer R. E, Batra S., Buechel D., et al. Heat-Assisted Magnetic Recording // IEEE Trans. Magn. – 2006. – V. 42. – P. 2417-2421.
- [90] Seigler M. A., Challener W. A., Gage E., et al. Integrated Heat Assisted Magnetic Recording Head: Design and Recording Demonstration // IEEE Trans. Magn. – 2008. – V. 44. – P. 119.
- [91] Binder K., Landau D.P. Critical properties of the two-dimensional anisotropic Hiesenberg model // Phys. Rev. B. - 1976. - V. 13. - N. 3. - P. 1140.
- [92] Li Y. and Baberschke K. Dimensional crossover in ultrathin Ni(111) films on W(110) // Phys. Rev. Lett. – 1992. – V. 68. – P. 1208.
- [93] Booth I., MacIsaac A.B., Whitehead J.P., De’Bell K. Domain structures in ultrathin magnetic films // Phys. Rev. Lett. - 1995. - V. 75. - P. 950.
- [94] Ambrose M.C. and Stamps R.L. Monte Carlo simulation of the effects of higher-order anisotropy on the spin reorientation transition in the two-dimensional Heisenberg model with long-range interactions // Phys. Rev. B. - 2013. - V. 87. - P. 184417.
- [95] Bordel C., Juraszek J., Cooke D.W. et al. Fe Spin reorientation across the metamagnetic transition in strained FeRh thin films // Phys. Rev. Lett. - 2012. - V. 109. - P. 117201.
- [96] Carubelli M., Billoni O.V., Pighin S.A. et al // Phys. Rev. B. - 2008. - V. 77. - P. 134417.
- [97] Dillmann O., Janke W., Muller M. and Binder K. // J. Chem. Phys. – 2001. – V. 114. – P. 5853.

- [98] Privman V. Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, ed Privman V. Singapore: World Scientific 1990.
- [99] Paierls R. On Ising's Model of Ferromagnetism // Proc. Cambridge. Phil. Soc. - 1936. - V.32. - P.477-481.
- [100] Kramers H.A., Wannier G.H. Statistic of the Two-Dimensional Ferromagnet // Phys. Rev. - 1941. - V. 60. - P. 252-262.
- [101] Onsager L. A two-dimensional model with an order-disorder transition // Phys. Rev. - 1944. - V. 65. - P. 117-149.
- [102] Blavats'ka V., Ferber C., Holovatch Yu. Polymers in long-range-correlated disorder // Phys. Rev. E. - 2001. - V. 64. - P. 041102.