ФГБОУ ВПО «ОмГУ им. Ф.М. Достоевского»

На правах рукописи
*УДК 530.1*

Поспелов Евгений Анатольевич

# **Численные исследования неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем**

Специальность 01.04.02 —
«Теоретическая физика»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор Прудников В.В.

Омск – 2014

# Содержание

# Введение

Одной из наиболее интересных и актуальных задач физики конденсированного состояния остается проблема описания фазовых переходов второго рода и связанных с ними критических явлений [1–9]. По мере приближения к точке фазового перехода наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических величин, характеризующиеся эффективно сильным взаимодействием между собой. Большой практический интерес к изучению фазовых переходов обусловлен тем, что вблизи критической точки даже незначительное изменение внешних условий может вызвать существенное изменение характеристик системы.

Строгое описание систем при фазовом переходе второго рода - задача чрезвычайно сложная. Выявленная общность свойств фазовых переходов в различных веществах позволила сформулировать принцип универсальности критических явления и предложить модель, в основе которой лежит гипотеза масштабного подобия флуктуаций [3–6]. Развитые на основе этой гипотезы методы ренормализационной группы и теоретико-полевого описания позволили сделать значительный скачок в качественном понимании и количественном описании критических явлений [10–17]. Наряду с особенностями равновесных характеристик, в критической точке сингулярное поведение демонстрируют динамические корреляционные функции и функции отклика, что обусловлено аномально большими временами релаксации сильно флуктуирующих величин. Эти особенности значительно затрудняют описание критической динамики системы [18–23].

Большое влияние на критическое поведение макроскопических систем оказывает структурный беспорядок, обусловленный присутствием структурных примесей. В реальных материалах всегда присутствуют те или иные дефекты. Присутствие примесей, наличие в эффективном гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, задающих состояние системы, играют важную роль в критическом поведении. Структурные дефекты могут иметь различную природу и оказывать различное влияние на процессы, протекающие в твердых телах, как то индуцировать новые типы фазовых переходов, задавать новые классы универсальности критического поведения, модифицировать кинетические свойства систем и обуславливать низкочастотные особенности в динамике системы [2, 24–28]. По этой причине, описание влияния дефектов структуры во всех возможных формах их проявления остается одной из актуальных и сложных проблем теории фазовых переходов и критических явлений. Так в ферромагнитном кристалле часть ячеек может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент. Если концентрация немагнитных атомов превышает определенную величину, ферромагнетизм полностью подавляется.

Одной из нерешенных задач теории критических явлений остается описание неравновесного критического поведения макроскопических систем, далеких от состояния равновесия. Это, прежде всего, относится к явлениям критической релаксации однородных и структурно неупорядоченных систем при фазовых переходах второго рода и фазовых переходах первого рода близких ко второму. Критическое замедление времени релаксации и аномально большие времена корреляции различных состояний для данных систем приводят к реализации динамического скейлингового поведения даже когда системы находятся в состояниях, далеких от состояния термодинамического равновесия [29–32]. В настоящее время значительные усилия направлены на исследование поведения различных систем в окрестности точки фазового перехода [33–36].

Значительный интерес на неравновесном этапе эволюции представляют эффекты старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы, обусловленные существованием двухвременных зависимостей для корреляционной функции и функции отклика от времени наблюдения и времени ожидания (промежуток времени от момента приготовления образца до момента времени измерения его свойств). Первоначально, эффекты старения были обнаружены в сложных спин-стекольных системах [37–41]. В то же время, данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [42–47] , наблюдаются и в системах в окрестности точки фазового перехода второго рода, так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации. Введенное ранее для спиновых стекол флуктуационно-диссипативное отношение, связывающее двухвременную спиновую функцию отклика и двухвременную корреляционную функцию и обобщающее флуктуационно-диссипативную теорему на случай неравновесного поведения, становится новой универсальной характеристикой для критического поведения различных систем. Проявление эффектов старения в неравновесной критической динамике было подтверждено в ходе различных экспериментальных исследований [48–52].

Наибольшего прогресса исследователи достигли при изучении влияния некоррелированных дефектов типа случайной локальной температуры на критическое поведение неупорядоченных систем. Ренормгрупповой анализ с использованием $\varepsilon$–разложения [26], а затем более точного теоретико-полевого подхода показал, что критическое поведение структурно неупорядоченных изингоподобных систем со случайно распределенными ($\delta$–коррелированными) примесями действительно характеризуется новым набором статических критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных дефектов в области их малых концентраций. Однако сходимость асимптотических рядов $\varepsilon$–разложения для систем с дефектами еще более слабая, чем для однородных. В то же время, остается актуальным вопрос о влиянии сильного разбавления спиновой системы немагнитными атомами примеси. Согласно теории перколяции, после увеличения концентрации дефектов выше некоторого порогового значения (порог примесной перколяции, для кубической решетки соответствует концентрации спинов $\approx 0.69$ (в приближении взаимодействия ближайших соседей)), примеси могут образовывать связанную структуру. Влияние этого примесного перколяционного порога до сих пор остается открытой проблемой.

В последние десятилетия широкое распространение в теории критических явлений получили компьютерные методы моделирования как статического, так и динамического критического поведения различных систем, ставшие альтернативой физическим экспериментам [53–56]. Численные исследования основаны на использовании метода Монте-Карло и были хорошо апробированы на большинстве модельных систем. Компьютерное моделирование дает возможность получения наглядной информации о росте флуктуаций параметра порядка и замедлении процессов релаксации в магнетиках по мере приближения к температуре фазового перехода второго рода, о проявлении аномальных свойств в поведении теплоемкости, магнитной восприимчивости и корреляционных функций [57,58]. А при исследовании сильно неупорядоченных систем численное исследование оказывается единственной альтернативой реальному физическому эксперименту, поскольку методы ренормализационной группы оказываются справедливы только в области малых концентраций дефектов.

В окрестности температуры $T_c$ фазового перехода второго рода время релаксации является расходящейся величиной: $t_{\rm rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Таким образом, системы в критической точке не достигают равновесия в течение всего релаксационного процесса. Для чистых систем в работах [59,60] было проведено численное исследование методами Монте-Карло критической динамики трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. В работе [59] получено значение динамического критического индекса $z = 2.62$, а в [60] – $z = 2.35(2)$ 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 [61] для слабо разбавленного изингоподобного магнетика $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$. В работе [62] было осуществлено теоретико-полевое 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. В работах Вакилова и Прудникова [25] на основе анализа результатов компьютерного моделирования критической динамики разбавленных магнетиков, была выдвинута гипотеза существования двух классов универсальности критического поведения неупорядоченных систем с различными значениями критических индексов для слабо и сильно неупорядоченных систем. Для слабо неупорядоченных систем полученные значения индекса $z$ хорошо согласуются с результатами экспериментального и ренормгруппового исследований.

Ренормгрупповые расчеты предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^{\infty}$ в рамках метода $\varepsilon$ - разложения для диссипативной модели с не сохраняющимся параметром порядка были проведены в работах [45,46]. Были получены значения $X^{\infty} = 0.429(6)$ для чистой системы в двухпетлевом приближении и $X^{\infty} \simeq 0.416$ в однопетлевом приближении. Проведенные исследования показали, что сложности выделения флуктуационных поправок в двухвременных зависимостях корреляционной функции и функции отклика не позволяют однозначно выявить характер влияния дефектов на $X^{\infty}$ для структурно неупорядоченной и бездефектной моделей Изинга.

В связи с вышеизложенным, в диссертационной работе были поставлены следующие цели:

1. Исследование влияния немагнитных атомов примеси на критическое поведение изингоподобных спиновых систем посредством численного моделирования методами Монте-Карло трехмерной модели Изинга для случаев слабого и сильного уровня разбавления.

2. Численное исследование методом коротковременной динамики процесса критической эволюции трехмерной неупорядоченной модели Изинга. Определение значений для независимых динамических $\theta'$, $z$ и статических $\beta$, $\nu$ критических индексов с учетом ведущих поправок к скейлингу.

3. Численное исследование эффектов старения в поведении однородной и структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Расчет и анализ двухвременных зависимостей корреляционной функции и функции отклика для различных значений времени ожидания.

4. Исследование нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в критическом поведении трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. Расчет предельного флуктуационно-диссипативного отношения и выявление влияния структурного беспорядка на его значение.

**Научная и практическая** значимость работы.

Исследование влияния структурного беспорядка на критическое поведение различных систем представляет фундаментальный интерес с точки зрения теории фазовых переходов. Как правило, все реальные вещества содержат различные дефекты структуры, которые существенно влияют на их поведение в критической области. В то же время, аналитическое описание характеристик систем в случае сильного разбавления сопряжено со значительными трудностями, поэтому численное исследование остается одним из самых важных источников информации в теории критических явлений.

Экспериментальные исследования материалов в критической области предъявляют высокие требования как к чистоте исследуемых образцов, так и к условиям проведения экспериментов. Реальные вещества подвержены эффектам старения, которые проявляются тем сильнее, чем больше времени прошло с момента приготовления образца. Данные эффекты могут оказать существенное влияние на получаемые в экспериментальном исследовании результаты. Таким образом, численное исследование может дать важную информацию об этих явлениях.

В ходе исследования был разработан набор программ для ЭВМ, который может служить отправной точкой для исследования неравновесного критического поведения сложных спиновых систем со структурным беспорядком.

Полученные в диссертации результаты вносят существенный вклад в развитие численных методов моделирования структурно неупорядоченных моделей, дают обоснование и развитие представлений теории критических явления неупорядоченных систем, могут являться отправной точкой для последующих исследований в данной области физики.

Вместе с этим, значимость диссертации определяют следующие основные положения, выносимые на защиту:

1. Методика численного исследования неравновесного критического поведения трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга методом коротковременной динамики и методика определения критических индексов с учетом ведущих поправок к скейлингу.

2. Наличие нескольких динамических этапов релаксации в поведении слабо неупорядоченной системы: временная область с характеристиками

однородной системы, кроссоверная область и область влияния структурного беспорядка.

3. Возникновение нового класса универсальности сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга при спиновых концентрациях меньших порога примесной перколяции.

4. Численное доказательство существования эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга и доказательство влияния структурной неупорядоченности на эти явления, характеризующиеся усилением эффектов старения.

5. Численное подтверждение нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы и расчет флуктуационно-диссипативного отношения для трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. Выявление влияния структурного беспорядка на значения флуктуационно-диссипативного отношения в сравнении с чистой моделью.

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на XI Всероссийской молодежной школе-семинаре по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, 2010), семинаре "Вычислительная физика: алгоритмы, методы и результаты"(Таруса, 2011), научно-практических конференциях "Молодежь третьего тысячелетия"(Омск, 2012, 2013), 55-й научной конференции МФТИ (Москва, 2012) и международной конференции "XXV IUPAP Conference on Computational Physics"(Москва, 2013), а также на научных семинарах кафедры теоретической физики ОмГУ.

**Публикации по теме диссертации.**


1. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Krinitsin A.S., Vakilov A.N., Rychkov M.V., Pospelov E.A. Short-time dynamics and critical behavior of the three-dimensional site-diluted Ising model // Phys. Rev. E. 2010. Vol. 81. P. 011130.

2. Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А. Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведе-

ния неупорядоченных систем // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98, вып. 10. С. 693 - 699.

3. Прудников В. В., Прудников П. В., Поспелов Е. А. Численные исследования влияния дефектов структуры на эффекты старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга // ЖЭТФ. 2014. Т. 145, вып. 3. С. 462 - 471.

4. Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н., Поспелов Е.А., Питеримов А.Ю., Чабров А.В. Численные исследования неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга // Вестник Омского университета. 2012. Вып. 2. С. 101 - 105.

5. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. Компьютерное моделирование эффектов старения в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченной модели Изинга // Вестник Омского университета. 2013. Вып. 2. С. 87 - 91.

6. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. Численные Монте-Карло исследования эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении трехмерной неупорядоченной модели Изинга // Вестник Омского университета. 2013. Вып. 4. С. 102 - 106.

7. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. Компьютерное моделирование эффектов старения в неравновесном критическом поведении стуктурно неупорядоченных изингоподобных магнетиках // Труды 55 научной конференции МФТИ. Общая и прикладная физика. 2012. С. 107 - 108.

8. Поспелов Е.А. Исследование эффектов старения в аномально медленной динамике структурно неупорядоченной модели Изинга // ФМ ОмГУ 2013: сборник статей региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике, Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та. 2013. С. 66 - 69.

9. Прудников В.В., Поспелов Е.А. Численное исследование эффектов старения в неравновесном критическом поведении неупорядоченных изингоподобных систем // Сборник трудов XXXVI региональной научно-практической студенческой конференции «Молодежь третьего тысячелетия», Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та. 2012. С. 161 - 164.

10. Прудников В.В., Поспелов Е.А. Исследование неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга с точечными дефектами // Сборник трудов XXXV региональной научно-практической студенческой конференции «Молодежь третьего тысячелетия», Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та. 2011. С. 97 - 100.

11. Прудников В.В., Поспелов Е.А. Исследование критической динамики сильно неупорядоченной модели Изинга // Сборник трудов XXXIV региональной научно-практической студенческой конференции «Молодежь третьего тысячелетия», Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та. 2010. С. 122 - 125.

12. Прудников П.В., Поспелов Е.А. Численное исследование неравнновесной критической динамики неупорядоченной модели Изинга методом коротковременной динамики // XI Всероссикая молодежная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния: Тезисы докладов, Екатеринбург: Институт физики металлов УрО РАН. 2010. С. 80.

13. Прудников В.В., Прудников П.В., Рычков М.В., Шляхтин А.О., Поспелов Е.А. Исследование неравновесной критической эволюции структурно неупорядоченной модели Изинга // Вестник Омского университета. 2008. Вып. 4. С. 35 - 39.

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

*В первой главе*, носящей обзорный характер, в краткой форме излагаются основные идеи и методы, применяемые для описания критических явлений. Рассматриваются особенности влияния структурно неупорядоченных систем на процессы, происходящие при фазовых переходах второго рода.

Описываются отличительные стороны исследования неравновесной критической динамики. Представлен обзор существующих достижений в данной области.

*Во второй главе* представлены результаты исследования влияния случайно распределенных немагнитных дефектов на критическое поведение трехмерной модели Изинга в случаи слабого разбавления. Описаны отличительные особенности коротковременной динамики, способы получения набора критических показателей, а также детали компьютерного моделирования исследуемой системы.

*Третья глава* посвящена исследованию влияния примесного порога перколяции на критическое поведение неупорядоченной модели Изинга. Приведены результаты моделирования коротковременной динамики для систем с концентрацией спинов $p = 0.6$ и $0.5$. Показано существование нового класса универсальности критического поведения для случая сильно неупорядоченных систем.

*В четвертой главе* представлены результаты исследования эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в критическом поведении однородной и неупорядоченной модели Изинга. Проводится анализ двухвременных корреляционных функций и функций отклика системы на внешнее возмущений.

*В заключении* сформулированы основные оригинальные результаты по итогам диссертационной работы.

# Глава 1

# Фазовые переходы и критические явления. Характеристики и свойства. Методы моделирования

Переход между различными кристаллическими модификациями совершается путем фазового перехода, при котором происходит скачкообразная перестройка кристаллической решетки, и состояние тела испытывает скачок. Однако наряду с такими скачкообразными переходами возможен и другой тип переходов, связанных с изменением симметрии.

Фазовый переход, при котором происходит скачкообразное изменение симметрии, но состояние тела меняется непрерывно, называется фазовым переходом второго рода [1] в противоположность фазовым переходам первого рода, где состояние вещества меняется скачком, называемым в этой связи переходами первого рода. Таким образом, фазовый переход второго рода является непрерывным в том смысле, что состояние тела меняется непрерывным образом. Однако, симметрия в точке перехода меняется, разумеется, скачком, и в каждый момент можно указать, к которой из двух фаз относится тело. Но в то время как в точке фазового перехода первого рода вещество находятся в равновесии в двух различных состояниях, то в точке фазового перехода второго рода состояния обеих фаз совпадают. Изменение симметрии тела при фазовом переходе второго рода может осуществляется посредством смещения атомов в решетке, а также посредством изменения упорядоченности кристалла [1, 2]. Понятие об упорядоченности появляется, если число узлов решетки, в которых могут находиться атомы данного рода, превышает число этих атомов. Места, на которых находятся атомы данного рода во вполне упорядоченном кристалле, называются «своими» в противоположность «чужим», на которые атомы частично переходят при «разупорядочении» кристалла. Во многих случаях оказывается, что свои и чужие узлы геометрически подобны друг другу и отличаются только тем, что для них различны вероятности нахождения атомов данного рода. Если эти вероятности в своих и чужих местах сравняются (при этом, конечно, они не будут равны единице), то все эти узлы станут эквивалентными, а следовательно, появятся новые элементы симметрии, т. е. повысится симметрия решетки. Такой кристалл мы будем называть неупорядоченным.

Фазовые переходы второго рода не обязательно должны быть связаны с изменением симметрии именно расположения атомов в решетке. Путем перехода второго рода может осуществляться также и взаимное превращение двух фаз, отличающихся каким-либо другим свойством симметрии. Таковы точки Кюри ферромагнитных или антиферромагнитных веществ; в этом случае меняется симметрия расположения элементарных магнитных моментов в теле. Фазовыми переходами второго рода являются также переход металла в сверхпроводящее состояние (в отсутствие магнитного поля) и переход жидкого гелия в сверхтекучее состояние. В обоих этих случаях состояние тела меняется непрерывным образом, но в точке перехода тело приобретает качественно новое свойство.

Поскольку состояния обеих фаз в точке перехода второго рода совпадают, то ясно, что симметрия тела в самой точке перехода должна содержать все элементы симметрии обеих фаз. Симметрия в самой точке перехода совпадает с симметрией везде по одну сторону от этой точки, т.е. с симметрией одной из фаз. Таким образом, изменение симметрии тела при фазовом переходе второго рода обладает следующим весьма существенным общим свойством: симметрия одной из фаз является более высокой, а симметрия другой фазы - более низкой по отношению друг к другу. Симметрия называется более высокой, если она включает в себя все элементы (повороты, отражения и трансляционные периоды) другой, более низкой, симметрии и, сверх того, еще дополнительные элементы. При фазовом переходе первого рода изменение симметрии тела не подчинено никаким ограничениям, и симметрии обеих фаз могут не иметь ничего общего друг с другом.

Для количественной характеристики изменения структуры тела при прохождении через точку фазового перехода можно ввести величину $\psi$ - параметр порядка $[1, 2, 7–9]$ , - определенную таким образом, чтобы она пробегала отличные от нуля (положительные или отрицательные) значения в несимметричной фазе и была равна нулю в симметричной фазе. В зависимости от температуры, параметр порядка ведет себя следующим образом:

$$\psi(T) = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \neq 0, & T < T_c, \end{cases} \tag{1.1}$$

где $T$ - температура среды, $T_c$ - критическая точка, то есть значение температуры при которой происходит фазовый переход. В случае магнитных систем $T_c$ получила название температуры Кюри. Для переходов, связанных со смещением атомов от их положений в симметричной фазе, под $\psi$ можно понимать величину этого смещения. Для магнитных переходов под $\psi$ можно понимать макроскопический магнитный момент (отнесенный к единице объема) ферромагнетика или магнитный момент подрешетки - в случае антиферромагнетика.

Отметим, что симметрия тела меняется (повышается) лишь в тот момент, когда $\psi$ обращается в точности в нуль; любое сколь угодно малое, но отличное от нуля значение параметра порядка приводит уже к понижению симметрии. При прохождении через точку фазового перехода второго рода обращение $\psi$ в нуль происходит непрерывным образом, без скачка.

Отсутствие скачка состояния в точке фазового перехода второго рода приводит к тому, что термодинамические функции состояния тела (его энтропия, энергия, объем и др.) остаются непрерывными при прохождении через точку перехода. Поэтому фазовый переход второго рода, в отличие от переходов первого рода, не сопровождается выделением или поглощением тепла. Однако, производные от указанных термодинамических величин (например, теплоемкость тела, коэффициент теплового расширения, сжимаемость и др.) испытывают скачок в точке перехода второго рода.

## 1.1 Критические индексы

При исследовании фазовых переходов особый интерес представляет собой поведение различных термодинамических функций в окрестности $T_c$. Эта область называется *критической*. Особое внимание уделяется определению значений совокупности показателей, которые описывают эффективное степенное поведение различных интересующих нас термодинамических и корреляционных функций вблизи температуры фазового перехода [64].

Асимптотический критический показатель $\lambda$ некоторой наблюдаемой величины $f(\tau)$ в окрестности критической точки $T_c$ определяется как

$$\lambda \sim \lim_{\tau \to 0} \frac{\ln f(\tau)}{\ln |\tau|}, \tag{1.2}$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$ - приведенная температура (отклонение от критической точки). Данный предел $\lambda$ получил название критического показателя, свзянного с функцией $f(\tau)$. (1.2) можно представить в виде:

$$f(\tau) \sim |\tau|^{\lambda}, \tag{1.3}$$

Данный степенной закон является точным в асимптотическом режиме $\tau \to 0$. Вне критической точки, поведение функции характеризуется более сложной зависимостью и может быть описано разложением Вегнера [63]

$$f(\tau) \approx A|\tau|^{\lambda}(1 + A_1|\tau|^{\omega\nu} + A_2|\tau|^{2\omega\nu} + ...), \tag{1.4}$$

где $A_i$ - не универсальные критические амплитуды.

При исследовании критического поведения получению показателей системы уделяется значительно больше усилий, чем по получению полного виды функции $f(\tau)$. Можно выделить две основные причины такого положения вещей. Во-первых, экспериментально установлено, что вблизи критической точки поведение функции-многочлена выражают главным образом ее ведущие члены. Получаемые в экспериментальных исследованиях результаты, представляемые в виде графиков в двойном логарифмическом масштабе, имеют вид прямых. И показатели определяются из наклона этих прямых. Таким образом, критические показатели всегда измеримы, в отличии от всей функции. Во-вторых, из общей теории термодинамики и статистической физики известно много соотношений между показателями, которые справедливы для любой частной системы.

Существует простая однозначная связь между критическим показателем и поведением рассматриваемой функции вблизи критической точки ($\tau \ll 1$). Если критический показатель $\lambda$, определяемый уравнением (1.3)), отрицателен, то соответствующая функция $f(\tau)$ вблизи критической точки расходится, стремясь к бесконечности; положительные же значения $\lambda$ соответствуют функции $f(\tau)$, обращающейся в этой точке в нуль. Чем меньше $\lambda$, тем более резкими изменениями вблизи температуры фазового перехода характеризуется поведение $f(\tau)$ в том смысле, что для отрицательных $\lambda$ расходимость $f(\tau)$ становится сильнее, а для положительных — $f(\tau)$ стремится к нулю быстрее.

В случае фазового перехода второго рода из парамагнитного в ферромагнитное состояние поведение намагниченности $m(\tau)$, магнитной восприимчивости $\chi(\tau)$ и теплоемкости $C(\tau)$ описывается следующими критическими индексами [1, 64]

$$\begin{aligned} m(\tau) &\sim (-\tau)^{\beta}, \\ \chi(\tau) &\sim |\tau|^{-\gamma}, \\ C(\tau) &\sim |\tau|^{-\alpha}, \end{aligned} \tag{1.5}$$

где $\alpha,\ \beta$ и $\gamma$ - критические индексы.

Свойства систем при непрерывных фазовых переходах определяются сильными и долгоживущими флуктуациями параметра порядка. Мерой магнитных флуктуаций является корреляционная длина $\xi(\tau)$ - область с сильно коррелированными спинами. Поскольку по мере приближения $T$ к $T_c$ сверху, корреляция в ориентации спинов увеличивается, $\xi(\tau)$ будет возрастать при приближении $T$ к $T_c$. Расходимость $\xi(\tau)$ в окрестности критической точки описывается критическим индексом $\nu$:

$$\xi(\tau) \sim |\tau|^{-\nu}. \tag{1.6}$$

Вследствие долгоживущих флуктуаций намагниченности, время релаксации системы $t_{rel}$ в окрестности $T_c$ неограниченно возрастает. Это явление получило название критического замедления. Для его характеристики был введен динамический критический индекс $z$, определяемый соотношением

$$t_{rel}(\tau) \sim \xi^{-z} \sim |\tau|^{-z\nu}. \tag{1.7}$$

Поведение намагниченности в присутствие внешнего магнитного поля в критической точке описывается показателем $\delta$

$$m(h)|_{T=T_c} \sim h^{1/\delta}, \tag{1.8}$$

а индекс $\eta$ определяет поведение корреляционной функции параметра порядка

$$G(\vec{r})|_{T=T_c} \sim \frac{1}{|\vec{r}|^{d-2+\eta}}. \tag{1.9}$$

Далее в диссертации будет рассматриваться фазовый переход второго рода из парамагнитного в ферромагнитное состояние.

Было установлено, что критические индексы не являются независимыми, а связаны между собой с помощью набора равенств. В качестве примера можно привести равенство Рашбрука

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \tag{1.10}$$

равенство Уидома

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \tag{1.11}$$

равенства Гриффитса

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2, \tag{1.12}$$

$$\gamma(\delta + 1) = (2 - \alpha)(\delta - 1), \tag{1.13}$$

равенства Фишера

$$(2 - \eta)\nu = \gamma, \tag{1.14}$$

$$d\alpha = 2 - \eta. \tag{1.15}$$

Соотношения (1.10) - (1.15) показывают, что независимыми являются только два показателя.

Совокупный набор критических показателей систем связан с понятием *класса универсальности* в критическом поведении различных систем. Говорят что системы принадлежат к одному классу универсальности, если они имеют совпадающие в пределах погрешности наборы критических индексов. В этом случае они демонстрируют одинаковое критическое поведение вблизи точки фазового перехода.

## 1.2 Модель Изинга

При описании поведения некоторой системы при фазовом перехоже одними из основных ее параметров являются размерность системы - $d$, и число компонент параметра порядка - $n$. Эти характеристики являются определяющими при аналитическом описании критических явлений методами ренормализационной группы. В зависимости от числа компонент параметра порядка можно выделить следующие модели магнетиков

- $n = 1$ – модель Изинга;
- $n = 2$ – XY модель;
- $n = 3$ – модель Гейзенберга.

Рассмотрим $d$-мерную решетку размером $L$, в узлах которой находятся спины. В общем виде, гамильтониан данных моделей может быть записан в виде

$$H = -J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{h} \sum_i \vec{S}_i, \tag{1.16}$$

где $\vec{S}_i$ - $n$-компонентный вектор спиновой переменной, $\vec{h}$ - внешнее магнитное поле, $< i, j >$ - означают, что суммирование по $j$ проходит только по ближайшим соседям спина в узле $i$. Интеграл обменного взаимодействия $J$ является мерой силы взаимодействия между ближайшими соседними спинами. Если $J > 0$, то, исходя из гамильтониана (1.7) минимум энергии достигается в случае, когда ближайшие спины соноправлены, то есть система является ферромагнитной. При $J < 0$ предпочтительным является состояние с противоположно направленными спинами, то есть вещество является антиферромагнетиком.

Модель Изинга является одной из самых распространенных моделей фазового перехода в статистической физике. Модель была предложена Ленцем с целью изучения фазового перехода из парамагнитного в ферромагнитное состояние. Она была исследована его дипломником Изингом, который при расчете термодинамических свойств модели в одномерном случае обнаружил, что в ней отсутствует фазовый переход.

Дальнейшие исследования показали, что в двухмерном и трехмерном случаях модель Изинга действительно описывает фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние при температуре $T_c$, связанной с появлением спонтанной намагниченности на решетке при $T < T_c$ в отсутствие внешнего магнитного поля. Первое исследование ферромагнитных свойств двухмерной модели Изинга было выполнено Пайерлсом [66] и развито Крамерсом и Ваннье [67]. Была точно определена температура фазового перехода $kT_c/J = 2/\ln(1+\sqrt{2}) = 2.269$, где $k$ - константа Больцмана, $J$ - интеграл обменного взаимодействия.

Осангером [68] было получено точное решение задачи о фазовом переходе в двухмерной модели Изинга. Им было показано, что точное вычисление свободной энергии приводит к существенному отличию поведения термодинамических величин от того, которое предсказывалось приближенными теориями, например методом среднего поля.

Особая роль модели Изинга в статистической физике объясняется тем, что она нашла применение при исследовании самых разнообразных магнитных и немагнитных систем. С ее помощью могут быть описаны ферромагнетики, антиферромагнетики, ферримагнетики, решеточная модель жидкости, различные бинарные смеси и сплавы, адсорбция на поверхности, «плавление» ДНК и другие системы. Это объясняет огромный интерес к исследованию свойств изингоподобных систем как аналитическими методами [42, 45, 62, 69, 70] , так и численных исследований методом Монте-Карло [25, 26, 60].

В основе модели Изинга лежат следующие упрощения: пренебрегается кинетической энергией атомов в узлах решетки, параметр порядка является однокомпонентным ($n = 1$) и может принимать только два дискретных значения, в энергии взаимодействия учитывается вклад только ближайших соседей. Исходя из (1.16), гамильтониан модели представим в виде

$$H = -J\sum_{<i,j>} S_i S_j - h\sum_i S_i, \tag{1.17}$$

где $S_i = \pm 1$, $J > 0$ - для случая ферромагнитного вещества.

### 1.2.1 Метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло используется в численной физике для статистического моделирования на ЭВМ систем со многими степенями свободы. В его основе лежит использование случайных чисел для машинной имитации распределений вероятности [54, 55, 64]. Метода Монте-Карло применяется как для определения различных характеристик системы в рамках классических спиновых моделей [64], так и для исследования систем в рамках квантовой теории [65]. Стоит отметить, что качество результатов моделирования зависит от качества используемого генератора случайных чисел [71–73].

Рассмотрим применение метода Монте-Карло к моделированию системы спинов в рамках модели Изинга [55, 64]. Пусть исследуется система, состоящая из $N$-частиц, находящаяся в объеме $V$ при постоянной температуре $T$. Поскольку возможно моделирование только ограниченного числа $k$ из полного, в общем случае огромного, набора конфигураций $K$, то среднее значение некоторой величины $< F >$ можно оценить как

$$< F >= \frac{1}{Z}\sum_{n=1}^{K} F_n \exp(-\frac{E_n}{kT}) \cong \frac{\sum_{n=1}^{k} F_n \exp(-\frac{E_n}{kT})}{\sum_{n=1}^{k} \exp(-\frac{E_n}{kT})}, \tag{1.18}$$

где $E_n$ и $F_n$ - полная энергия и значение физической величины $F$ в конфигурации $n$. Простейшая процедура Монте-Карло, казалось бы, состоит в том, что создается случайная конфигурация $n$, вычисляются $E_n$, $F_n$ и подсчитывается вклад этой конфигурации в среднее значение $< F >$. Но в этом случае, при равномерной выборке конфигураций, многие из них оказываются маловероятными и дают малый вклад в сумму. Для повышения точности вычислений используется метод существенной выборки, повышающий статистический вес каждой конфигурации, и создающий конфигурации в соответствии с функцией распределения $P_n$. Использование существенной выборки приводит к уменьшению статистической погрешности без увеличения числа конфигураций. В этом случаи процедура нахождения среднего значения аппроксимируется следующим выражением

$$< F > \cong \frac{\sum_{n=1}^{k} \frac{F_n}{P_n} \exp(-\frac{E_n}{kT})}{\sum_{n=1}^{k} \frac{1}{P_n} \exp(-\frac{E_n}{kT})}. \tag{1.19}$$

Функция распределения $P_n$ выбирается в виде канонического распределения

$$P_n = \frac{\exp(-\frac{E_n}{kT})}{\sum_{n=1}^{k} \exp(-\frac{E_n}{kT})}, \tag{1.20}$$

при котором среднее значение $< F >$ превращается в среднее арифметическое

$$< F > \cong \frac{1}{k} \sum_{n=1}^{k} F_n. \tag{1.21}$$

В этом случаи динамика системы представляет собой марковский процесс перехода из одного состояния в другое, для которого вероятность перехода в новую конфигурацию зависит только от предыдущего состояния системы. Фазовую траекторию схематично можно представить в виде

$$... \xrightarrow{W} n \xrightarrow{W} n' \xrightarrow{W} n'' \xrightarrow{W} .... \tag{1.22}$$

Вероятность перехода $W$ из одного состояния в другое должна удовлетворять следующим условиям:

1. $W(n \to n') \geq 0$ для любых состояний $n$, $n'$,
2. $\sum_{n'} W(n \to n') = 1$,
3. $\sum_{n} W(n \to n') P_n = P_{n'}$.

Третий пункт задает требование выполнения детального баланса.

### 1.2.2 Алгоритмы моделирования

Существуют различные реализации динамики системы, определяемой цепочкой переходов (1.22). Используемые для численного исследования фазовых переходов второго рода методы моделирования можно поделить на две группы: локальные или односпиновые и кластерные алгоритмы. Кластерные методы используются для уменьшения времени критического замедления (а следовательно, и ускорения расчетов) при исследовании равновесных характеристик системы. Однако, они настолько сильно меняют динамику системы, что становятся неприменимыми для исследования неравновесной критической эволюции.Наилучшими методами в этой области оказываются локальные алгоритмы. Они соответствую релаксационной динамике модели с несохраняющемся параметром порядка (модель A в классификации Гальперина-Хоэнберга [74]) и позволяют сравнивать результаты численного исследования с результатами ренормгруппового или теоретико-полевого описания. Характерной особенностью локальных алгоритмов является то, что переход от одной конфигурации к следующей осуществляется переворотом одного спина системы.

Одним из наиболее используемых локальных алгоритмов является **алгоритм Метрополиса** [55, 64]. Его основной особенностью является применимость для большого числа различных систем, как то коротко- или дальнодействующее взаимодействие спиновых переменных, кубические, сферические или треугольные модели. Вероятность перехода из состояния $\{n\}$ в $\{n'\}$ определяется соотношением

$$W(\{n\} \to \{n'\}) = \begin{cases} 1 & H(\{n'\}) < H(\{n\}) \\ \exp[-\frac{1}{kT}(H(n') - H(n))] & H(\{n'\}) \geq H(\{n\}). \end{cases} \tag{1.23}$$

В выражении было использовано то, что полная энергия системы описывается гамильтонианом (1.17): $E_n = H(\{n\})$.

Другим локальным методам, используемом в настоящей диссертации, является **алгоритм тепловой бани** (heat-bath algorithm) [55]. Он применим только к решеточным моделям с ограниченным набором степеней свободы для переменной параметра порядка. Допустим, что при переходе состояния системы из конфигурации $\{n\}$ в конфигурацию $\{n'\}$ меняется значение спина $S_n$ на $S_{n'}$. Тогда вероятность перехода определяет проверкой всех возможных состояний спина $S_{n'}$ в окружении его ближайших соседей

$$W(\{n\} \to \{n'\}) = \frac{\exp[-\frac{1}{kT}H(\{n'\})]}{\sum_{S_{n_0}} \exp[-\frac{1}{kT}H(\{n_0\})]}. \tag{1.24}$$

В знаменателе выражения (1.24) суммирование идет по всем возможным состояниям спина $S_n$ при общей конфигурации $\{n\}$. Модель Изинга характеризуется наличием только двух возможных состояний спина и вероятность переворота может быть записана в виде

$$W(\{n\} \to \{n'\}) = \frac{\exp[-\frac{1}{kT}H(\{S_{n'}\})]}{\exp[\frac{1}{kT}H(\{S_n\})] + \exp[-\frac{1}{kT}H(\{S_n\})]}. \tag{1.25}$$

Различие в вероятностях перехода двух алгоритмов демонстрируется на рис. 1.1. Использование алгоритма тепловой бани позволило получить двух-

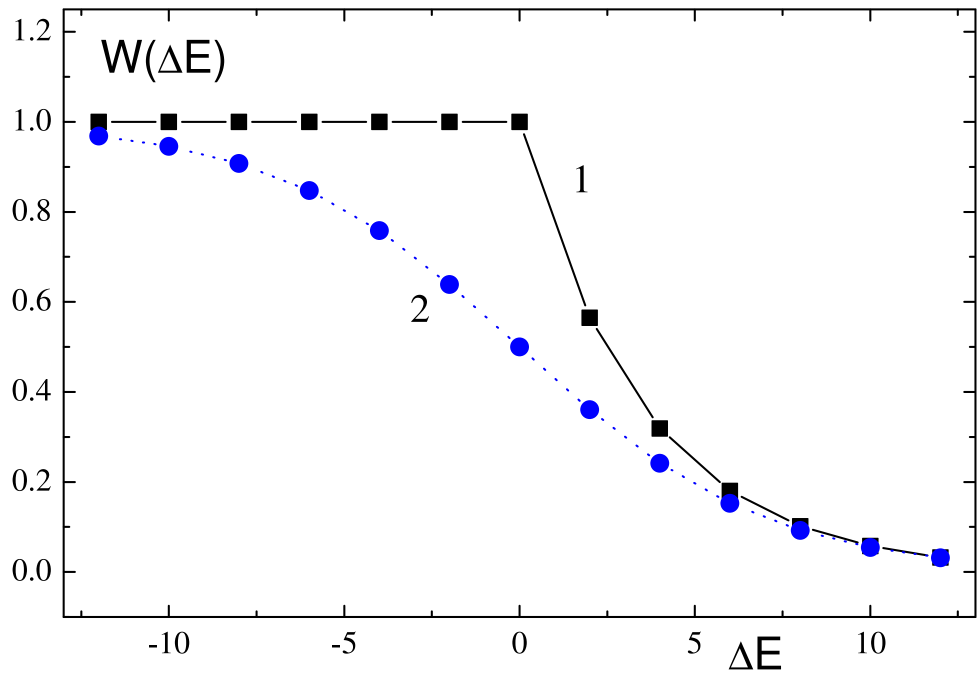


Рисунок 1.1: Вероятность переворота спина $W$ в критической точке $T = T_c$ для алгоритмов Метрополиса – $(1)$ и тепловой бани – $(2)$.

временные зависимости функции отклика на внешнее магнитное поле. Подробный анализ приведен в главе $4$, но главная особенность расчетов состоит в том, что необходимо вычислить производную от вероятности перехода по внешнему полю. Как видно из приведенного графика и выражений (1.23, 1.25), в случае алгоритма Метрополиса данная производная терпит разрыв при $\Delta H = 0$, что делает неприменимым этот алгоритм для расчета функции отклика.

Наиболее общий локальный алгоритм для моделирования на ЭВМ может быть сформулирован в следующем виде.

1. Формируется начальная конфигурация.

2. Случайным образом выбирается спин и производится попытка его переворота.

3. Вычисляется вероятность переворота $W$

4. Создается случайное число $r$ в интервале $(0, 1)$.

5. Если $r \leq W$, то новая конфигурация принимается, иначе - остается неизменной.

6. Определяются значения исследуемых физических величин.

7. Повторяются шаги $2 - 6$ для получения достаточного числа конфигураций.

8. Производится усреднение по статистически независимым конфигурациям.

## 1.3 Влияние дефектов структуры

В реальных макроскопических системах всегда присутствуют те или иные дефекты. Дефекты структуры могут иметь различную природу и оказывать 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 в ферромагнитном кристалле часть ячеек может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент. Если концентрация немагнитных атомов превышает определенную величину, ферромагнетизм полностью подавляется. Другим примером служит ситуация, когда в решетке возможны дефекты, приводящие к случайно распределенным выделенным направлениям ориентации спинов. В качестве еще одного примера можно упомянуть переход жидкого $\mathrm{He}^4$ в сверхтекучее состояние в пористой среде.

Теоретическое изучение влияния случайно распределенных дефектов и примесей на различные явления началось много лет назад. Движение электронов в неупорядоченных твердых телах, перколяционная задача, модель Изинга со спинами на случайных узлах и другие подобные задачи привлекали к себе многих исследователей, результаты которых отражены в работах [75–77].

Причина, по которой влияние дефектов структуры на критическое поведение должно быть существенным, состоит в следующем. Допустим, что в систему, находящуюся вблизи критической точки, ввели малое количество примесей или разорвали в ней небольшое число связей. Такое изменение можно рассматривать как включение малого возмущения. Отклик системы на такое возмущение описывается на языке поведения различных восприимчивостей и корреляционных функций. Вблизи критической точки идеальной системы некоторые из этих величин велики и представляют собой сингулярные функции температуры. Это означает, что малое количество дефектов структуры может привести к большим эффектам вблизи критической точки, тем самым существенно изменяя критическое поведение чистой (однородной) системы. При этом могут измениться значения критических индексов. Возможно, что наличие дефектов приведет к сглаживанию сингулярного поведения некоторых величин. Может произойти размытие фазового перехода второго рода и исчезновение критической точки. Механизмы этих эффектов глубоко скрыты и до сих пор еще недостаточно изучены. Во всяком случае, ясно, что в неидеальной системе возникает характерный параметр – среднее расстояние между дефектами. При приближении к критической точке он начинает конкурировать с корреляционной длиной, что и обусловливает отклонение критического поведения неоднородной системы от поведения идеальной системы.

Дефекты принято разделять на два вида [2] в соответствии с их распределением в матрице. Если способ приготовления образца таков, что дефекты структуры находятся в равновесии с матрицей системы, то их принято называть расплавленными, или равновесными. Как правило, при приготовлении образца дефекты не успевают прийти в термодинамическое равновесие с матрицей и как бы замораживаются в ней в виде некоторой конфигурации, несущей память о способе приготовления системы. Такие дефекты принято называть замороженными.

В случае расплавленных дефектов структуры их концентрация играет роль дополнительной термодинамической переменной. Ее влияние на критическое поведение проявляется только в сдвиге критической температуры и перенормировке значений критических индексов с фактором $1/(1-\alpha)$, если индекс теплоемкости однородной системы $\alpha$ положителен [78].

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

$$H = \int \mathrm{d}^d x \Bigg\{ -h\phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} r\phi^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 + \frac{u}{4!}\phi^4(\mathbf{x}) + \\ + (\text{более высокие степени } \phi(\mathbf{x}), \nabla\phi(\mathbf{x})) \Bigg\}, \tag{1.26}$$

где $\phi(\mathbf{x})$ – $n$-компонентный параметр порядка; $h$ – внешнее поле, сопряженное параметру порядка; $r(T), u(T), \ldots$ – аналитические функции температуры $T$ и внешних параметров.

Однородные системы являются трансляционно инвариантными. Их поведение в критической точке (при температуре фазового перехода) определяется фиксированными точками уравнений ренормгруппы:

$$h = 0, \quad r = r^*, \quad u = u^*, \tag{1.27}$$

коэффициенты более высокой скейлинговой размерности равны нулю.

Неоднородные системы с замороженными примесями уже не являются трансляционно инвариантными. При этом параметры $h(\mathbf{x}), r(\mathbf{x}), u(\mathbf{x}), \ldots$ начинают зависеть случайным образом от координат.

Влияние случайности, вызванное присутствием дефектов, ослабевает с уменьшением скейлинговой размерности полей:

$h(\mathbf{x})$ – случайное поле (со средним значением равным нулю), характеризуется наиболее сильным влиянием на поведение систем при фазовых переходах;

$r(\mathbf{x})$ – 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);

$u(\mathbf{x}), \ldots$ – влияние этих полей на критическое (асимптотическое) поведение термодинамических функций несущественно.

Рассмотрим влияние дефектов структуры типа случайная температура фазового перехода на критическое поведение. Пусть $r(\mathbf{x}) = r + V(\mathbf{x})$, где $V(\mathbf{x})$ характеризует потенциал случайного поля дефектов в точке $\mathbf{x}$ с равным нулю средним значением по распределению дефектов:

$$\langle\langle V(\mathbf{x})\rangle\rangle = 0. \tag{1.28}$$

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

Распределение дефектов обычно задается через второй момент функции распределения

$$\langle\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{y})\rangle\rangle = g(\mathbf{x}-\mathbf{y}). \tag{1.29}$$

В простейшем случае некоррелированных точечных дефектов [79]:

$$g(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = v\delta^d(\mathbf{x}-\mathbf{y}), \tag{1.30}$$

где $v \sim$ (величина потенциала)$^2 \times$(концентрация дефектов); $d$ – размерность системы. Существуют более сложные и реалистичные модели. Модель с протяженными дефектами размерности $\varepsilon_d$, которые параллельны друг другу и хаотически распределены по объему образца [81], описывается распределением с

$$g(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = v\delta^{d-\varepsilon_d}(\mathbf{x}_\perp-\mathbf{y}_\perp). \tag{1.31}$$

Другая модель, предложенная Вейнрибом и Гальпериным [80], учитывает эффекты корреляции дефектов со случайной ориентацией и описывается распределением с

$$g(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = |\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{-a}. \tag{1.32}$$

Учет моментов более высокого порядка не существенен для критического поведения.

Функционал свободной энергии $F$ системы с дефектами определяется соотношением:

$$\exp(-F/kT) = \int \mathcal{D}\phi \, \exp\left(-H_0 - \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d V(x)\phi^2(x)\right), \tag{1.33}$$

где $H_0$ – гамильтониан однородной системы. Для слабо неоднородной системы можно воспользоваться разложением

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d V(x)\phi^2(x)\right) = 1 - \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x V(x)\phi^2(x) + \\ +\frac{1}{8}\int \mathrm{d}^d x \mathrm{d}^d y V(x)\phi^2(x)V(y)\phi^2(y) + \ldots \tag{1.34}$$

и провести усреднение по примесям:

$$\begin{aligned} \langle\!\langle F/kT \rangle\!\rangle &= (F_0/kT) + \qquad (1.35) \\ &+ \frac{1}{8}\int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, \langle\!\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{x})\rangle\!\rangle \left\langle \phi^2(x)\phi^2(y)\right\rangle_0 + \ldots, \end{aligned}$$

где $\langle \ldots \rangle_0$ – усреднение по распределению флуктуаций с гамильтонианом однородной системы $H_0$. Для однородных систем теплоемкость имеет вид

$$C = \frac{d^2(F_0/kT)}{dT^2} = \int d^d x \, d^d y \left\langle \phi^2(x)\phi^2(y)\right\rangle_0 \sim \tau^{-\alpha}, \tag{1.36}$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$. Используя гипотезу подобия, из которой следует, что свободная энергия $F_0 \sim \tau^{2-\alpha}$, и соотношений (1.7),(1.15) можно определить

$$\left\langle \phi^2(x)\phi^2(y)\right\rangle_0 = \tau^{-\alpha+d\nu} G\left(\frac{|x-y|}{\xi}\right).$$

Тогда асимптотическое поведение свободной энергии системы с дефектами как функции температуры может быть представлено в виде [77]:

$$\langle\!\langle F/kT \rangle\!\rangle = \tau^{2-\alpha} A + \frac{\tau}{8}^{-\alpha+d\nu} \int \mathrm{d}^d x \, (x) G\left(\frac{x}{\xi}\right) =$$

$$= \tau^{2-\alpha}(A + B\tau^{-\varphi} + \ldots), \tag{1.37}$$

где $\varphi$ – критический индекс кроссовера характеризует влияние дефектов на критическое поведение системы.

Очевидно, что при $\varphi > 0$ это влияние существенно и приводит к критическому поведению с новыми критическими индексами, при $\varphi < 0$ влияние дефектов несущественно и критическое поведение неупорядоченных систем будет характеризоваться критическими индексами систем без дефектов.

Для точечных дефектов (1.30)

$$\int \mathrm{d}^d x\, g(x) G(x/\xi) \sim \mathrm{const} \tag{1.38}$$

и, следовательно, $\varphi = \alpha$. Таким образом, *точечные дефекты существенны, если* $\alpha > 0$. Это утверждение составляет суть так называемого эвристического критерия Харриса [82], согласно которому при отрицательном индексе теплоемкости ($\alpha < 0$) критическое поведение слабо неоднородной 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.

Критический показатель теплоемкости зависит от числа компонент параметра порядка следующим образом:

$n = 1$ – изинговские магнетики: $\alpha = 0.109(4)$ [83],

$n = 2$ – $XY$ магнетики: $\alpha = -0.01278(24)$ [84],

$n = 3$ – гейзенберговские магнетики: $\alpha = -0.115(15)$ [85],

очевидно, что точечные некоррелированные дефекты существенны только для критического поведения изингоподобных систем ($n = 1$).

В случае модели протяженных дефектов

$$\int \mathrm{d}^d x\, g(x) G(x/\xi) \sim \tau^{\varepsilon_d \nu}, \tag{1.39}$$

поэтому $\varphi = \alpha + \varepsilon_d \nu$ [86], что приводит к новому критическому поведению.

В рамках модели Вейнриба–Гальперина

$$\int \mathrm{d}^d x\, g(x) G(x/\xi) \sim \tau^{(a-d)\nu} \tag{1.40}$$

и, следовательно, $\varphi = \alpha + (d-a)\nu = 2 - a\nu$ [80]. Видно, что протяженные дефекты и эффекты корреляции дефектов существенно сказываются на поведении более широкого класса систем, испытывающих фазовый переход второго рода. Таким образом, наличие дефектов небольшой концентрации не приводит к размыванию критического поведения. При этом, как показывают дополнительные исследования, влияние беспорядка, вызванного присутствием дефектов, сильнее проявляется в динамике.

Ренормгрупповой анализ с использованием $\varepsilon$–разложения [77, 79, 87] показал, что критическое поведение неупорядоченных изингоподобных систем с точечными дефектами действительно характеризуется новым набором критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных дефектов в области их малых концентраций. Однако сходимость асимптотических рядов $\varepsilon$–разложения для систем с дефектами еще более слабая, чем для однородных.

Экспериментальные исследования [88, 89] подтвердили численное отличие статических критических индексов для неупорядоченных систем от их значений для однородных систем и показали хорошее согласие с теоретическими результатами.

## 1.4 Особенности неравновесного критического поведения

В настоящее время большой интерес исследователей вызывает поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой [37, 38, 42]. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризуемыми нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Хорошо известными примерами подобных систем с аномально медленной динамикой и эффектами старения являются такие комплексные неупорядоченные системы, как спиновые стекла [38]. Однако указанные особенности неравновесного поведения, как показали различные исследования [42–44] , могут наблюдаться и в системах, испытывающих фазовые переходы второго рода. Это обусловлено тем, что их поведение вблизи критических температур характеризуется аномально большими временами релаксации.

Термодинамическое равновесия системы наступает на временах, значительно превышающих время релаксации $t \gg t_{rel}(T)$. На этом этапе эволюции динамика системы становится стационарной и инвариантной относительно обращения времени. На временах $0 < t \ll t_{rel}$ релаксация системы характеризуется нарушением трансляционной инвариантности и зависимостью от своего начального состояния. Поскольку в критической точке $T = T_c$ время релаксации является расходящейся величиной $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, термодинамическое равновесие не достижимо.

Традиционно считалось, что поведение системы на временах, далеких от равновесия, сильно зависит от ее микроскопических состояний. Однако проведенные ренормгрупповые исследования показали, что в неравновесном поведении различных корреляционных функций и других характеристик системы имеют место универсальные скейлинговые зависимости. Они проявляются начиная с некоторого микроскопического времени $t_{mic}$ [29,30]. Временной масштаб $t_{mic}$ – это время, за которое поведение системы перестает зависеть от микроскопических характеристик. Исследования показали, что это время чрезвычайно мало в случае модели Изинга. Таким образом, на временах $t_{mic} \ll t \ll t_{rel}$ существенным является влияние на поведение системы ее начального состояния.

При исследовании неравновесного критического поведения ферромагнетика выделяют *низкотемпературное* и *высокотемпературное* начальные состояния системы. Первое из них соответствует основному состоянию системы при $T = 0$ с полностью соноправленными спинами и характеризуется приведенной намагниченностью системы $m_0 = 1$. Высокотемпературное начальное состояние характеризуется сильной хаотизацией спинов $m_0 \ll 1$ и соответствует парамагнитному состоянию системы.

Неравновесная критическая динамика автокорреляционной функции параметра порядка системы характеризуется двухвременной зависимостью

[29]

$$C\left(t,t_w\right)=\frac{1}{V}\int d^dx\big[\left\langle S(x,t)S(x,t_w)\right\rangle-\left\langle S(x,t)\right\rangle\left\langle S(x,0)\right\rangle\big]. \qquad (1.41)$$

Если система находилась в высокотемпературном начальном состоянии, то в точке фазового перехода $T=T_c$ автокорреляционная функция будет характеризоваться следующей скейлинговой зависимостью

$$C\left(t,t_w\right)=(t-t_w)^{a+1-d/z}(t/t_w)^{\theta-1}f_c(t/t_w), \qquad (1.42)$$

, где $f_c$ – конечная функция своего аргумента, $a=(2-\eta-z)/z$, динамический показатель $\theta=\theta'-z^{-1}(2-z-\eta)$. Индекс $\theta'$ характеризует возрастание намагниченности $m(t)=\frac{1}{V}\int d^dx<S(x,t)>$ при эволюции из начального с малым значением $m_0$: $m(t)\sim m_0t^{\theta'}$. Время $t_w$ называют временем ожидания, или возрастом системы. Оно означает время, проведенное системой в неравновесном состоянии, до начала измерения искомых характеристик. Под $t-t_w$ понимается время наблюдения, или время проведения эксперимента. Стоит отметить, что эти характеристические времена много меньше времени релаксации, т.е. $t-t_w,t_w\ll t_{rel}$.

В зависимости от соотношения между временами наблюдения и ожидания, выделяют следующие режимы критической эволюции:

1. Квазиравновесный режим

$$t-t_w\ll t_w,\ C(t,t_w)=C(t-t_w)$$

2. Режим старения

$$t-t_w\sim t_w,\ C(t,t_w)\approx t_w^{-2\beta/\nu z}F_C(t/t_w)$$

3. Режим коротковременной динамики ($t_w/t\to 0$)

$$t-t_w\gg t_w,\ C(t,t_w)\sim (t/t_w)^{\theta-1}$$

Особую важность в численных исследованиях приобрели режимы 2 и 3. Режим старения демонстрирует замедлением релаксации системы с увеличением времени ожидания и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы. Данный этап критической эволюции подробно обсуждается в главе 4 настоящей диссертации.

На основе реномр-группового исследования третьего режима был развит метод коротковременной динамики (МКД). В его рамках предполагается получение и анализ временных зависимостей намагниченности, корреляционной функции и различных кумулянтов в предельном случаи $t_w \to 0$. Развитие МКД дало новые способы получения как динамических, так и статических критических индексов, а также измерение критической температуры. По сравнению с вычислением равновесных характеристик, МКД значительно менее требователен к временным затратам. В данной диссертации коротковременная динамика используется в главах 2 и 3 для получения критических показателей слабо и сильно неупорядоченных систем.

# Глава 2

# Исследование неравновесной критической релаксации слабо неупорядоченной модели Изинга

## 2.1 Введение

В последнее десятилетие был достигнут существенный прогресс в понимании и описании критического поведения макроскопических систем в режимах, далеких от состояния термодинамического равновесия [29, 30, 90–92]. Прежде всего, это относится к явлениям критической релаксации систем при фазовых переходах второго рода и фазовых переходах первого рода, близких ко второму. Определяющими особенностями неравновесного критического поведения подобных систем являются критическое замедление времени релаксации системы и аномально большие времена корреляции различных состояний системы. Данные особенности приводят к реализации динамического скейлингового поведения даже когда системы находятся в неравновесном состоянии. Основываясь на скейлинговом анализе временной зависимости термодинамических и корреляционных функций, в работах [29, 30, 93] был проведен ренормгрупповой анализ неравновесной эволюции системы в зависимости от начальных состояний, обоснован и предложен численный метод коротковременной динамики. В работе [29] 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 на макроскопически малых временах будет характеризоваться не уменьшением, а увеличением намагниченности. Возрастание намагниченности характеризуется новым независимым динамическим критическим индексом $\theta'$: $m(t) \sim t^{\theta'}$. При этом с увеличением времени коротковременная динамика роста параметра порядка сменяется на долговременную динамику его уменьшения по степенному закону $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$.

Структурный беспорядок, обусловленный присутствием примесей или других дефектов структуры, и наличие в эффективном гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, задающих состояние неупорядоченной системы, зачастую играют важную роль в поведении реальных материалов и физических систем. Эти факторы, действующие по отдельности или проявляющиеся одновременно в структурно-неупорядоченных средах, могут приводить к новым типам фазовых переходов, задавать новые классы универсальности критического поведения, модифицировать кинетические свойства систем и обуславливать низкочастотные особенности в динамике системы [26, 27]. Типичными примерами подобных систем являются неупорядоченные магнитные системы с примесью немагнитных атомов, антиферромагнетики во внешнем магнитном поле, спиновые стекла. Статистические особенности описания неупорядоченных систем с замороженным беспорядком и эффекты критического замедления, усиливаемые дефектами структуры, создают значительные трудности как для аналитического описания, так и для численного моделирования поведения подобных систем.

При низкой концентрации дефектов структуры можно пренебречь их корреляцией в пространственном распределении внутри образца. В этом приближении можно считать, что вызываемые наличием примесей эффекты типа флуктуаций локальной температуры фазового перехода, или случайные поля, сопряженные параметру порядка, описываются гауссовыми законами распределения и являются некорреклированными ($\delta$-коррелированные, или точечные дефекты). Существенность влияния подобного рода дефектов на критическое поведение системы определяется критирием Харриса [82], согласно которому точечные дефекты модифицируют критическое поведение лишь изингоподобных систем

Настоящая глава посвящена численному исследованию трехмерной слабо неупорядоченной модели Изинга в присутствии точечных дефектов со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.8$ методом коротковременной динамики.

## 2.2 Метод коротковременной динамики

При численном исследовании систем методом Монте-Карло в области фозового перехода второго рода, характерной особенностью является эффект критического замедления. Это явления характеризуется тем, что время релаксации системы неограниченно растет по мере приближения к критической температуре. Этот рост затрудняет получение равновесных характеристик системы, таких как магнитная восприимчивость или теплоемкость. В критической области время релаксации является расходящейся величиной $\tau_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Стоит отметить, что значение динамического показателя $z$ в случае примесных систем, как правило, больше, чем для однородных. Уменьшить влияние критического замедления на получаемых характеристики возможно с помощью кластерных алгоритмов, например алгоритмы Вольфа и Сведсена-Ванга, однако они столь существенно меняют динамику системы по сравнению с алгоритмами последовательно переворота спинов (алгоритм Метрополиса, динамика тепловой бани), что делает невозможным их использование для изучения основных явлений неравновесной релаксации.

На основе ренормгруппового анализа в 1989 г. в работе Янсена [29] было показано, что на относительно малых промежутках времени, далеких от состояния термодинамического равновесия исследуемой системы, различные характеристики системы, такие как намагниченность, автокорреляционная функция или кумулянты, демонстрируют универсальную скейлинговую временную зависимость. Используя данные зависимости, возможно получение набора критических показателей, как статических, так и динамических. На основе этой работы, в численном моделировании получил развитие новый метод исследования критических явлений - метод коротко временной динамики (МКД).

Данный метод был апробирован многочисленными исследованиями [**?**, **?**, 94–98], 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.

В методе коротко временной динамики универсальное критическое поведение можно наблюдать в начале критической эволюции, после некоторого микроскопического временного масштаба $t_{mic}$, который достаточно большой отрезок в микроскопическом смысле, но все еще мал в макроскопическом. На временах $t > t_{mic}$ для $k$-го момента намагниченности реализуется следующая скейлинговая форма:

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{\frac{-k\beta}{\nu}} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (2.1)$$

где $L$ - линейный размер решетки, $b$ - произвольный масштабный фактор, $t$ - время, $\tau = (T - T_c)/T_c$ - приведенная температура, $x_0$ - новый независимый критический индекс, задающий скейлинговую размерность начального значения намагниченности $m_0$.

Поскольку на начальной стадии динамической эволюции корреляционная длина еще достаточно мала, влияние конечного размера системы не существенно. При численном исследовании МКД возможен выбор двух типов начальных состояний, а именно состояние с начальной намагниченностью $m_0 = 1$ или $m_0 \ll 0$. Первое из них называют *низкотемпературным* начальным состоянием, поскольку система из одинаково ориентированных спинов соответствует основному состоянию с температурой $T = 0$. Состояние с $m_0 \ll 0$ соответствует парамагнитной фазе ферромагнетика при $T \gg T_c$ и называется *высокотемпературным*. Рассмотрим случай с малой начальной намагниченностью системы. Предполагая размерность системы $L$ достаточно большим и полагая масштабный фактор $b = t^{1/z}$, для малой величины

$m_0 t^{1/z}$ из уравнения (2.1) можно получить намагниченность ($k = 1$) в виде:

$$m(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^{\theta'}(1 + At^{1/\nu z}\tau) + O(\tau^2, m_0^2), \tag{2.2}$$

где $\theta' = (x_0 - \beta/\nu)\frac{1}{z}$ - используется как независимый динамический критический индекс. В критической точке $\tau \to 0$ и для достаточно малого промежутка времени получаем следующую временную зависимость:

$$m(t) \sim m_0 t^{\theta'}. \tag{2.3}$$

Выражение (2.3) показывает, что при начальном состоянии с малой намагниченностью $m_0$ ранний этап неравновесной релаксации характеризуется возрастанием намагниченности системы. Временной интервал возрастания намагниченности может быть оценен как $t_{cr} \sim m_0^{-1/(\theta' = \beta/\nu)}$ и заметно растет с уменьшением начальной намагниченности.

Рассмотрим случай $m_0 \to 0$. Используя уравнение (2.1), можно получить временную зависимость второго момента намагниченности в виде:

$$m^{(2)}(t) \sim t^{-2\beta/\nu z} M^{(2)}(1, t^{-1/z}L). \tag{2.4}$$

На начальном этапе неравновесного режима пространственная корреляционная длина ещё достаточно мала, в том числи и в критической области. Тогда второй момент намагниченности можно оценить как $m^{(2)}(1, t^{-1/z}L) \sim L^{-d}$, где $d$ - размерность системы. Подставляя в (2.4), получаем следующую временную зависимость

$$m^{(2)}(t) \sim t^{-c_2}, c_2 = (d - \frac{2\beta}{\nu})\frac{1}{z}. \tag{2.5}$$

С помощью конечномерного скейлингого анализа для системы с начальным состоянием $m_0 \to 0$ было показано, что автокорреляционная функция $C(t)$ имеет временную зависимость:

$$C(t) \sim t^{-c_a}, c_a = \frac{d}{z} - \theta'. \tag{2.6}$$

При рассмотрении низкотемпературного начального состояния $m_0 = 1$, используя разложение (2.1), намагниченность получается в виде:

$$
\begin{aligned}
M\left(t,\tau\right) &= t^{-\beta/\nu z} \\
&\times M\left(1, t^{1/\nu z}\tau\right) \\
&\sim t^{-\beta/\nu z}\left(1 + At^{1/\nu z}\tau + O(\tau^2)\right).
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

В пределе $\tau \to 0$ временная зависимость намагниченности принимает вид:

$$
M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \tag{2.8}
$$

При исследовании релаксационного процессы из низкотемпературного начального состояния также определялись временные зависимости для логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2(t) = \frac{m^2(t)}{(m(t))^2} - 1$. В МКД их степенные законы имеют вид:

$$
\begin{aligned}
\partial_\tau lnM(t) &\sim t^{1/\nu z}, \\
U_2(t) &\sim t^{d/z}.
\end{aligned}
\tag{2.9}
$$

Моделирование и анализ намагниченности, её второго момента и кумулянта $U_2$ позволяют определить значения динамического критического индекса $z$ и статистических показателей $\beta$ и $\nu$.

## 2.3 Модель и методика расчетов

Было проведено исследование влияния случайно распределенных немагнитных дефектов на критическое поведение ферромагнитной модели Изинга в случае слабого разбавления. Под слабым разбавлением понимается значение спиновой концентрации выше порога примесной перколяции $p_c^{(imp)}$. В данной главе представлены результаты моделирования системы со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.8$. Для обеих систем было исследовано низкотемпературное начальное состояние, а для системы с $p = 0.8$ также было проведено моделирование высокотемпературного начального состояния.

Численное исследование проводилось на трёхмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ и наложенными периодическими граничными условиями. Гамильтониан неупорядоченной модели Изинга представляется в виде:

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j S_i S_j, \tag{2.10}$$

где $J > 0$ - константа обменного взаимодействия, $S_i$ - спин в узле $i$ равный $\pm 1$, сумма $< i, j >$ включает в себя только ближайших к $i$-тому спину соседей. Числа $p_i$ характеризуют наличие в системе $\delta$-коррелированного беспорядка и принимают значение 1, если в узле спин, и 0 - если немагнитный атом примеси. Они определяются канонической функцией распределения

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

где $p$ - концентрация спинов. Дефекты структуры равномерно распределяются по решетке и при моделировании их положение фиксируется для отдельной примесной конфигурации. Для уменьшения влияния размерности системы на критическое поведение были выбраны периодические граничные условия. Численное моделирование динамики системы осуществлялось с помощью алгоритма Метрополиса.

При исследовании низкотемпературного начального состояния рассчитывались намагниченность:

$$m(t) = \left[ < \frac{1}{pL^3} \sum_{i}^{pL^3} p_i S_i(t) > \right], \tag{2.11}$$

и её второй момент:

$$m^2(t) = \left[ < (\frac{1}{pL^3} \sum_{i}^{pL^3} p_i S_i(t))^2 > \right], \tag{2.12}$$

используемый для вычисления кумулянта $U_2$. Для вычисления логарифмической производной $\partial_\tau \ln M(t)$ осуществлялся расчет намагниченности для двух температур, смещенных относительно критической $T_c$ на интервал $\Delta T = \pm 0.005$.

При исследовании высокотемпературного начального состояния происходил расчёт намагниченности (2.11), её второй момент (2.12) и автокорреляционной функции

$$C(t) = \left[< \frac{1}{pL^3} \sum_{i}^{pL^3} p_i S_i(t) S_i(0) >\right]. \tag{2.13}$$

В формулах (2.11) – (2.13) угловые скобки означают статистическое усреднение по реализациям начального состояния системы, квадратные - усреднение по различным реализациям примесной структуры с требуемой концентрацией.

В качестве единицы времени в численных исследованиях критических явлений используется шаг Монте-Карло на спин - MCS/s - под которым понимается переворот всех спинов системы в единицу времени. Поведение системы исследовалось на временах до $1000$ MCS/s. Использовалась известные критические температуры $T_c(p = 0.95) = 4.26267(4)$ и $T_c(p = 0.8) = 3.49948(18)$, полученные в работе [96].

## 2.4 Исследование влияния низкотемпературного начального состояния на неравновесное критическое поведение системы

При моделировании из низкотемпературного начального состояния $m_0 = 1$ вычислялись значения намагниченности $m(t)$ (2.11), её второго момента $m^{(2)}(t)$ (2.12), используемого для определения кумулянта $U_2$ (2.9), а также логарифмической производной $\partial_\tau \ln M(t)$ на временах до $1000$ $MCS/s$. Для систем с $p = 0.95$ проводилось усреднение вычисляемых величин по $6000$ различным примесным конфигурациям, с $p = 0.80$ – по $10000$.

На рис. 2.1 представлены полученные временные зависимости намагниченности $m(t)$ для систем с концентрацией спинов $p = 0.95$ и $p = 0.8$ в двойном логарифмическом масштабе. По данной кривой были получены значения показателя $\beta/\nu z$ для указанных систем.

На рис. 2.2–2.3 приведены полученные кривые для логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2(t)$ для спиновых концентраций $p =$

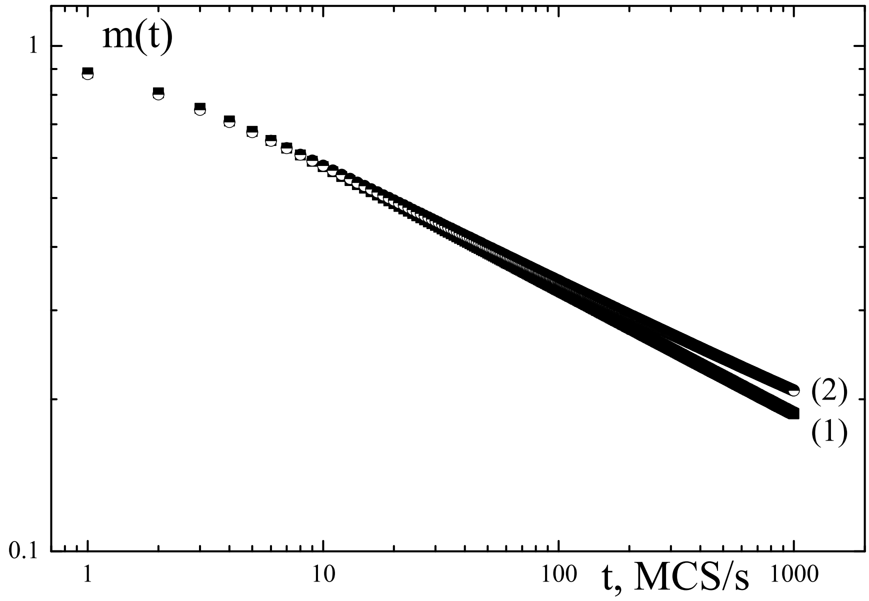


Рисунок 2.1: Временная зависимость намагниченности для спиновых концентраций $p = 0.95(1)$ и $p = 0.8(2)$.

$0.95$ и $p = 0.8$, также представленные в двойном логарифмическом масштабе. Для получения логарифмической производной намагниченности по температуре был осуществлен расчет намагниченности выше и ниже критической точки $T_c \pm \Delta T$ с шагом $\Delta T = 0.05$. Полученная зависимость позволяет определить показатель $1/\nu z$. Анализ временной кривой кумулянта $U_2(t)$ позволил определить значение критического показателя $z$.

Важно отметить, что при определении критических показателей существенным является временной интервал, на котором осуществляется их поиск. При анализе полученных результатов в слабо неупорядоченных системах со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.80$, в отличие от поведения однородных систем [100], было выявлено два универсальных динамических режима со степенным временным изменением намагниченности, ее логарифмической производной по температуре и кумулянта $U_2(t)$. А именно, на раннем временном интервале $t = [20, 200]$ реализуется поведение, соответствующее поведению однородной системы, определяемое индексом $z = 2.03(1)$, а лишь затем, проходя через режим кроссоверного поведения, на временах $t > 400 MCS/s$ реализуется режим поведения неупорядоченной системы. На рисунках 2.4 - 2.6 демонстрируется существование двух

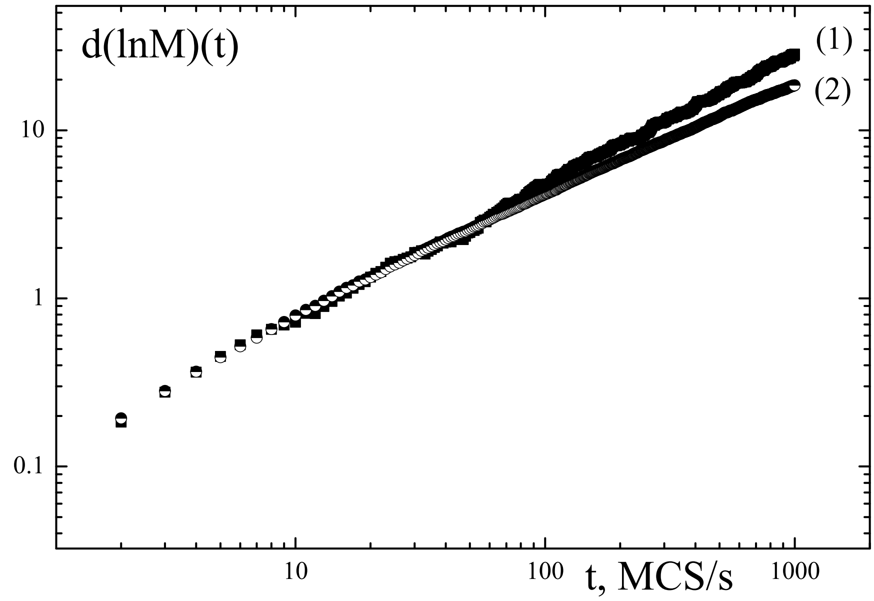


Рисунок 2.2: Временная зависимость логарифмической производной для спиновых концентраций $p = 0.95(1)$ и $p = 0.8(2)$.

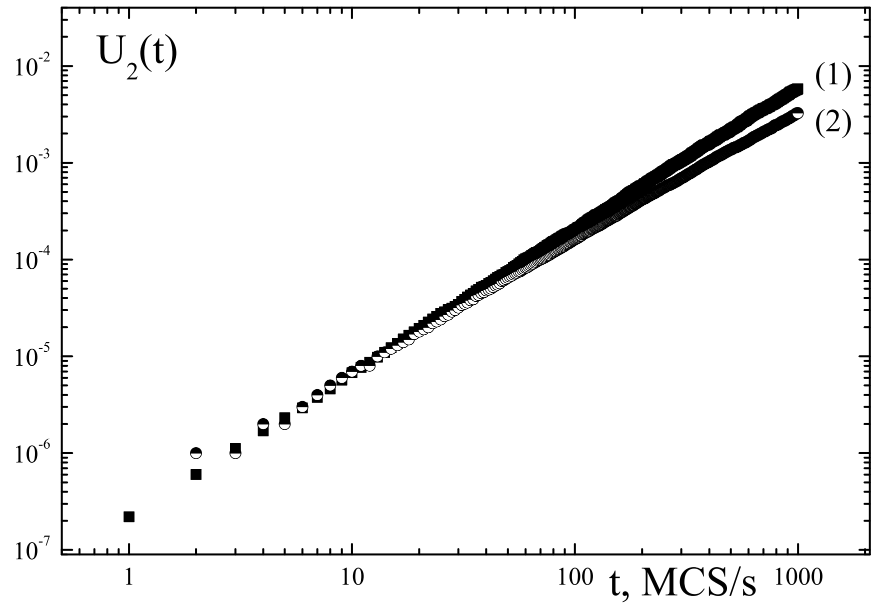


Рисунок 2.3: Временная зависимость кумулянта $U_2$ для спиновых концентраций $p = 0.95(1)$ и $p = 0.8(2)$.

режимов динамического критического поведения на примере системы с концентрацией спинов $p = 0.8$. На каждом из рисунков 2.4 - 2.6 пунктирной

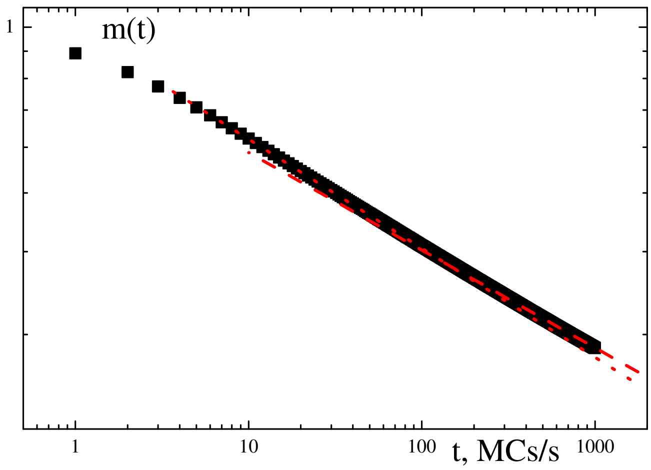


Рисунок 2.4: Существование двух режимов критического поведения для намагниченности для системы с $p = 0.8(2)$.

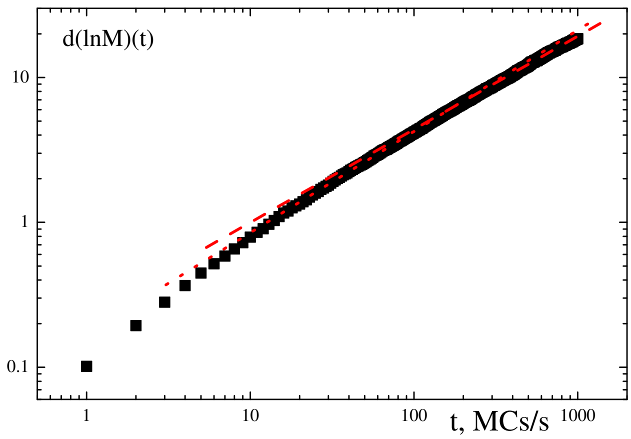


Рисунок 2.5: Существование двух режимов критического поведения для логарифмической производной для системы с $p = 0.8(2)$.

линией выделен участок влияния примесей, а точечной линией - начальный участок критической эволюции, соответствующий критическому поведению однородной системы.

При анализе полученных временных зависимостей, был проведен расчет критических индексов системы в соответствии с формулами 2.8 - 2.9. Для системы с концентрацией спинов $p = 0.95$ для выявления влияния дефектов был использован интервал $t \in [550;\ 950]\ MCS/s$ для всех вычисленных величин. При анализе результатов для системы с $p = 0.8$ для намагниченности использовался интервал $t \in [400;\ 950]\ MCS/s$, а для ее логарифмической

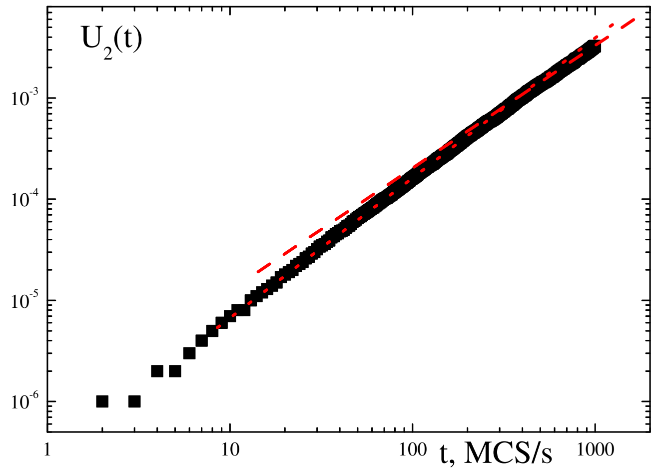


Рисунок 2.6: Существование двух режимов критического поведения для кумулянта $U_2(t)$ для системы с $p = 0.8(2)$.

производной и кумулянта $U_2(t)$ - $t \in [550;\ 950]\ MCS/s$. Значения отношений $\beta/\nu z$, $1/\nu z$ и $d/z$ приведены в таблице 2.1 Указанные показатели

Таблица 2.1: Значения критических показателей слабо неупорядоченной системы при моделировании из состояния с $m_0 = 1$

| Показатель | $p = 0.95$ | $p = 0.8$ |
|---|---|---|
| $\beta/\nu z$ | $0.213(2)$ | $0.213(2)$ |
| $1/\nu z$ | $0.600(8)$ | $0.600(8)$ |
| $d/z$ | $1.369(13)$ | $1.268(15)$ |
| $z$ | $2.191(21)$ | $2.366(28)$ |
| $\beta$ | $0.365(8)$ | $0.365(8)$ |
| $\nu$ | $0.704(18)$ | $0.704(18)$ |

были получены линейной аппроксимацией вычисленных данных в двойном логарифмическом масштабе.

Однако стоит отметить, что критическая температура в случае численного эксперимента всегда определяется с некоторой погрешностью. Как показали исследования методом коротко временной динамики показали, этот фактор существенно влияет с увеличением времени расчета. Таким образом, поведение термодинамических функции на этапе влияния структурного беспорядка подвержено отклонению от критической эволюции даже в критической точке. Для компенсации этого фактора, а также для уменьшения влияния конечности системы осуществляется анализ и учет поправок на скейлинг в соотношениях для степенных законов.

### 2.4.1 Учет скейлинговых поправок

В критической области поведение намагниченности описывается разложением Вегнера:

$$m(\tau) \sim A|\tau|^{\lambda}(1 + A_1|\tau|^{\omega\nu} + A_2|\tau|^{2\omega\nu} + A_3|\tau|^{\omega_2\nu}...),$$

в котором ведущая поправка к скейлингу определяется показателем корреляционной длины $\nu$ и индексом $\omega$, характеризующим поправку к скейлингу. В выражении $\tau$ – приведенная температура, $\lambda$ – исследуемый критический показатель. Данное разложение применимо к системам, находящимся в состоянии равновесия. При исследовании неравновесной критической релаксации имеет место временная зависимость ведущей поправки к скейлингу в форме $t^{-\omega/z}$ [59,97,99]. Для рассматриваемой системы это приводит к тому, что временные законы для намагниченности, ее логарифмической производной и кумулянта $U_2(t)$ модифицируются следующим образом:

$$\begin{aligned} m(t) &\sim t^{-\beta/\nu z}(A + Bt^{-\omega/z}), \qquad (2.14) \\ U^{(2)}(t) &\sim t^{d/z}(A + Bt^{-\omega/z}), \\ \partial_\tau \ln m(t) &\sim t^{1/\nu z}(A + Bt^{-\omega/z}). \qquad (2.15) \end{aligned}$$

В (2.14) $A(p)$ и $B(p)$ - неуниверсальные скейлинговые амплитуды, зависящие от исследуемой величины и спиновой концентрации. В данном случае производится учет ведущей поправки к скейлингу. Таким образом, для расчета скейлинговых поправок необходимо аппроксимировать полученные кривые выражением вида

$$X(t) = t^{\delta}(A + Bt^{-\omega/z}). \qquad (2.16)$$

В данной работе была реализована следующая процедура учета поправок к скейлингу

1. исследуемый временной интервал $[t_0; t_1]$ разбивался на все возможные интервалы с длиной $\Delta t = 50, ...., (t_1 - t_0)$;

2. выбирались значения $\omega/z$ с шагом $0.005$ в интервале $[0.04; 0.20]$;

3. на каждом временном интервале $\Delta t$ для каждого значения $\omega/z$ осуществлялась аппроксимация методом наименьших квадратов полученных данных выражением (2.16) для набора значений $\delta$;

4. выбирались интервалы, на которых достигался минимум аппроксимационной погрешности;

5. производилось усреднение выбранных на разных интервалах значений $\delta$ для конкретного $\omega/z$ и расчет погрешностей скейлинговой процедуры.

Пример зависимости погрешности метода наименьших квадратов (МНК) для фиксированного значения $\omega/z = 0.12$ приведен на рис. 2.7. Демонстрируется зависимость погрешности аппроксимации от значений показателя $\beta/\nu z$ для системы со спиновой концентрацией $p = 0.8$. Для каждого

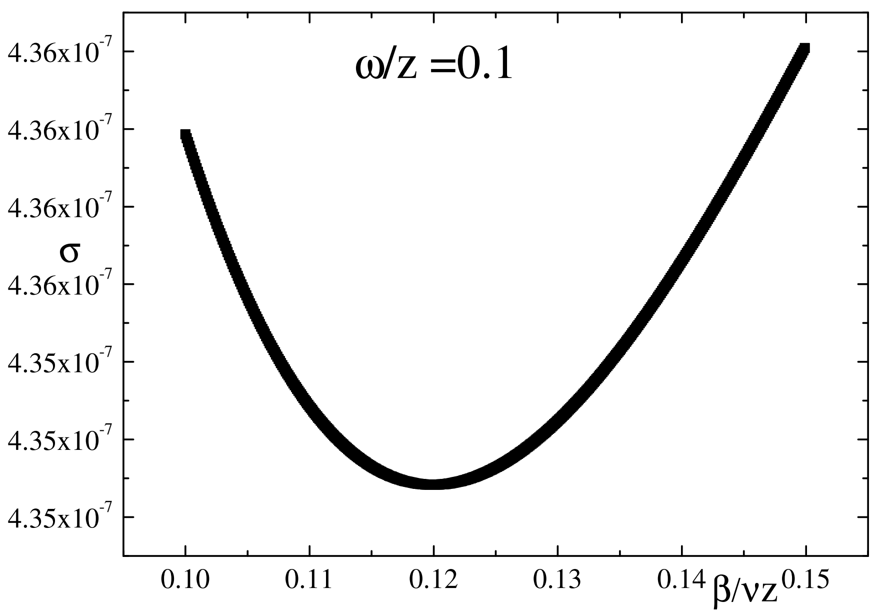


Рисунок 2.7: Зависимость погрешности МНК от показателя $\beta/\nu z$. Спиновая концентрация $p = 0.8$.

случая $\omega/z$ были выбраны все интервалы, на которых достигался минимум метода наименьших квадратов. Затем для конкретного значения $\omega/z$ проводилось усреднение полученных критических показателей и определение средней погрешности погрешности процедуры учета ведущих поправок. На рис. 2.8 показана зависимость итоговой погрешности от $\omega/z$.

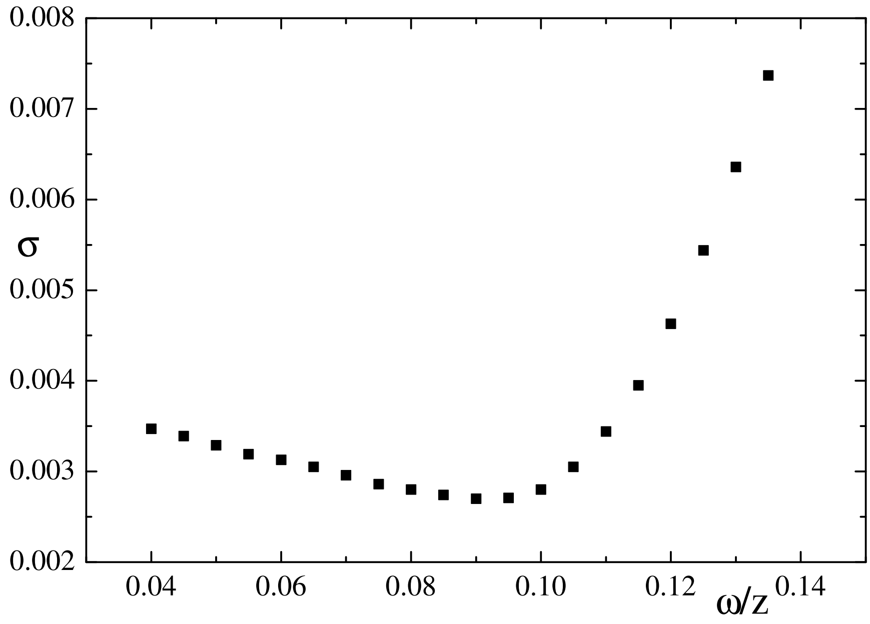


Рисунок 2.8: Зависимость погрешности скейлинговой процедуры от значений показателя $\omega/z$. Спиновая концентрация $p = 0.8$.

Указанная процедура была применена к полученным зависимостям намагниченности $m(t)$, ее логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянту $U_2(t)$. Итоговые полученные показатели приведены в таблице 2.2. Как следует из таблицы, критические показатели систем с $p = 0.95$ и $p = 0.8$ находятся в хорошем соответствии в пределах погрешностей. В погрешности найденных индексов также учитывается статистическая погрешность проведенного исследования. Для ее получения все полученные примесные конфигурации были разбиты на $5$ групп, которые рассматривались как статистически независимые. Путем усреднения данных внутри каждой группы были получены пять наборов критических показателей, с помощью которых и была рассчитана статистическая погрешность исследования.

Таблица 2.2: Значения критических показателей слабо неупорядоченной системы при моделировании из состояния с $m_0 = 1$ с учетом ведущей поправки к скейлингу.

| Показатель | $p = 0.95$ | $p = 0.8$ |
|---|---|---|
| $\beta/\nu z$ | $0.244(2)$ | $0.230(5)$ |
| $1/\nu z$ | $0.685(7)$ | $0.661(11)$ |
| $d/z$ | $1.373(15)$ | $1.359(11)$ |
| $< \omega >_{av}$ | $0.369(96)$ | $0.404(110)$ |
| $z$ | $2.185(25)$ | $2.208(32)$ |
| $\beta$ | $0.356(6)$ | $0.348(11)$ |
| $\nu$ | $0.668(14)$ | $0.685(21)$ |
| $\beta/\nu$ | $0.522(13)$ | $0.508(17)$ |

## 2.5 Исследование влияния высокотемпературного начального состояния на неравновесное критическое поведение системы

Высокотемпературное начальное состояние характеризуется высокой степенью хаотизации спиновых переменных, что приводит к малым значениям начальной намагниченности системы: $m_0 \ll 1$. Для получения начальной конфигурации с требуемым значением начальной намагниченности $m_0$ был реализован следующий алгоритм. После распределения дефектов на решетке, осуществлялся проход по всем спинам и им присваивалось значение $\sigma_i = +1$ с вероятностью $P(\sigma_i = +1) = (1 + m_0)/2$ и значение $\sigma_i = -1$ с вероятностью $P(\sigma_i = -1) = 1 - P(\sigma_i = +1)$. Затем переворотом отдельных спинов достигалась требуемая начальная намагниченность с точностью до $1/N$ ($N$ - полное число спинов в системе). Полученная спиновая конфигурация исследовалась при критической температуре.

Стоит отметить, что полученная таким образом конфигурация является существенно неравновесной, поскольку при моделировании системы не отводилось времени на релаксацию как при приготовлении, так и при исследовании в критической точке.

При исследовании эволюции намагниченности из начального состояния с $m_0 \ll 1$, в первую очередь интерес представляет определение асимптотического показателя $\theta'(m_0 \to 0)$, исходя из 2.3. Для его получения были использованы следующие значения начальной намагниченности системы: $m_0 = 0.01, 0.02$ и $0.03$. Временные зависимости намагниченности для указанных начальных состояний приведены на рисунке 2.9. Определяя наклон

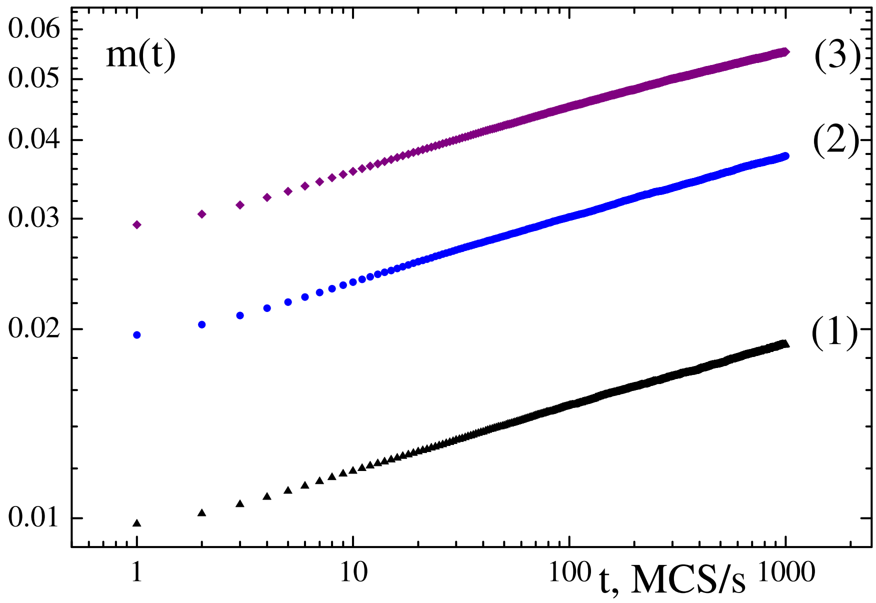


Рисунок 2.9: Временная релаксация намагниченности слабо неупорядоченной модели Изинга для начальных состояний с $m_0 = 0.01(1), 0.02(2)$ и $0.03(3)$.

каждой из представленных кривых, получаются значения $\theta'(m_0)$. Затем с помощью экстраполяции начального состояния $m_0 \to 0$ определяется искомое асимптотическое значение показателя $\theta'(m_0 \to 0)$.

В работе Янссена [29] было продемонстрировано, что рост намагниченности сменяется спаданием с зависимостью $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. Для сравнительного анализа влияния структурного беспорядка на этап роста намагниченности было проведено исследования однородной $p = 1$ системы на временах до $10000\ MCS/s$ и слабо неупорядоченной системы с концентрацией спинов $p = 0.8$ на временах до $40000\ MCS/s$. На рисунке 2.10 приведен результат моделирования обеих систем в двойном логарифмическом масштабе. Как видно из рисунка, этап возрастания намагниченности со временем действительно сменяется на ее спадание для каждой системы. На графиках схематично отмечены характерное время роста намагниченности $t_{cr}$, оцениваемое как

$$t_{cr} \sim m_0^{-1/(\theta'+\beta/z\nu)}.$$

Анализ полученных зависимостей показал, что несмотря на то, что начальная намагниченность однородной системы была меньше, чем при моделировании примесной модели, и, казалось бы, в соответствии с выражением для $t_{cr}$ должна демонстрировать более значительный участок роста, неупорядоченная систем обладает значительно более медленной динамикой. Так, этап роста намагниченности для однородной системы может быть оценен временами до $4000 MCS/s$, тогда как для слабо неупорядоченной – до 20000 $MCS/s$.

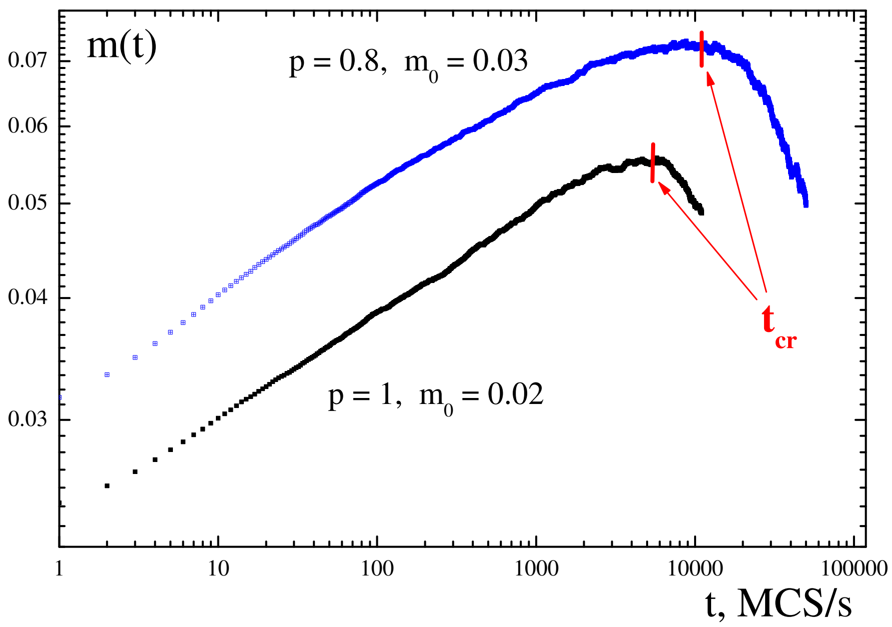


Рисунок 2.10: Временная релаксация намагниченности слабо неупорядоченной модели Изинга.$p = 0.8$, $m_0 = 0.03$.

Для случая высокотемпературного начального состояния в слабо неупорядоченной системы также было выявлено два типа универсального критического поведения, а именно на начальном участке поведение системы соответствует однородной модели, затем проходя через некоторый кроссоверный этап проявляется влияние дефектов структуры. При исследовании поведения намагниченности $m(t)$, автокорреляционной функции $C(t)$ (рис.

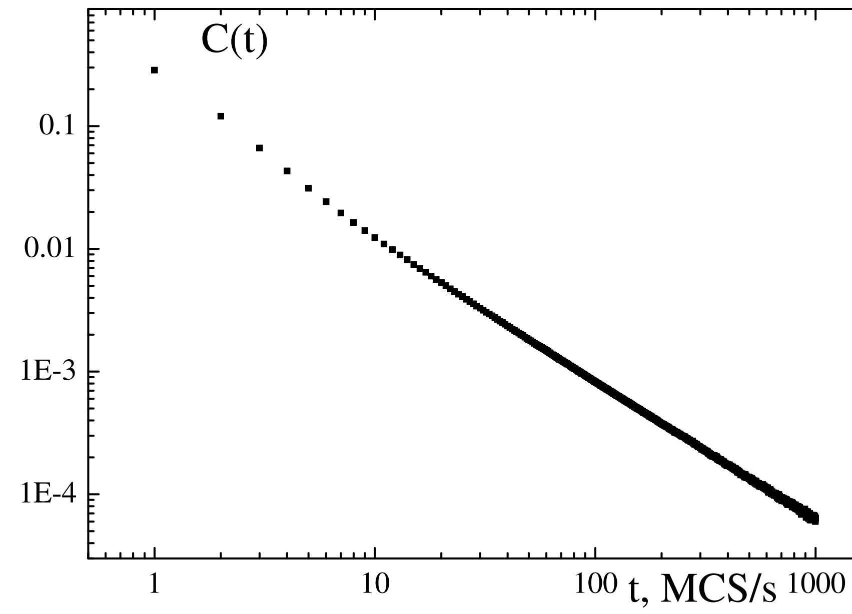


Рисунок 2.11: Временная зависимость автокорреляционной функции слабо неупорядоченной модели Изинга.

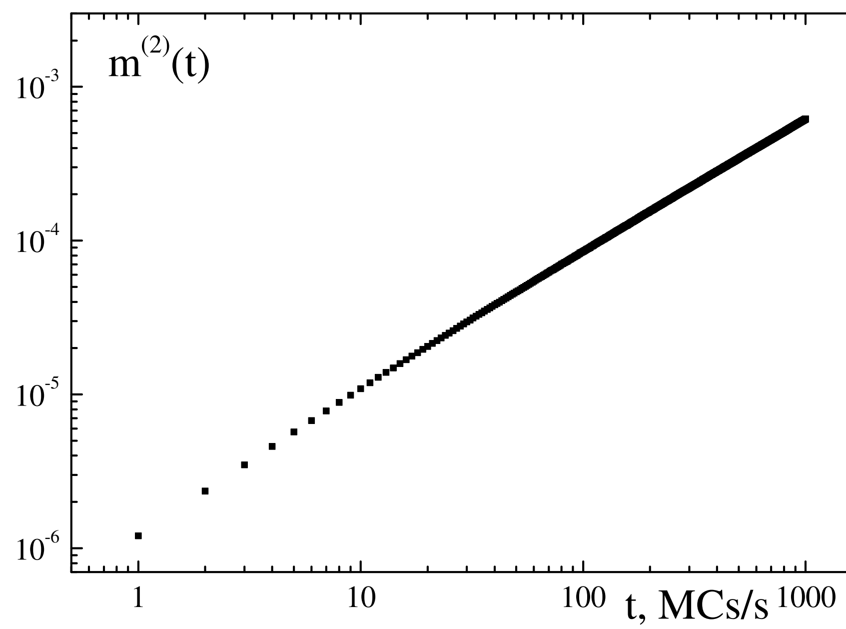


Рисунок 2.12: Временная зависимость второго момента намагниченности слабо неупорядоченной модели Изинга.

2.11) и второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ (рис. 2.12) было выявлено два временных интервала: $t < 90MCs/s$, на котором поведение системы аналогично однородной модели, и $t > 100MCs/s$, на котором проявилось влияния структурной неупорядоченности. Для расчета автокорреляционной функции и второго момента намагниченности использовалось начальное состояние с $m_0 = 0.0001$.

При анализе временных зависимостей намагниченности, ее второго момента и автокорреляционной функции, с помощью соотношений 2.5 - 2.6 были получены значения динамических критических индексов $\theta'$ и $z$, а также отношения статических индексов $\beta/\nu$. Результаты для начального временного интервала с критическим поведением однородной системы и временного интервала проявления влияния дефектов структуры представлены в таблице 2.3. Значения критических индексов получаемые на начальном

Таблица 2.3: Значения критических показателей слабо неупорядоченной системы, полученные линейной аппроксимацией временных зависимостей $m(t)$, $m^{(2)}(t)$ и $C(t)$.

| $m_0$ | $\theta'$ | $c_2$ | $c_a$ | $z$ | $\beta/\nu$ |
|---|---|---|---|---|---|
| | $t \in [15; 60]MCs/s$ | $t \in [5; 30]MCs/s$ | | | |
| 0.03 | 0.1016(9) | | | | |
| 0.02 | 0.1031(10) | | | | |
| 0.01 | 0.1043(12) | | | | |
| 0 | 0.1057(17) | 0.936(4) | 1.347(8) | 2.065(14) | 0.534(6) |
| | $t \in [300; 800]MCs/s$ | $t \in [150; 800]MCs/s$ | | | |
| 0.03 | 0.083(3) | | | | |
| 0.02 | 0.099(5) | | | | |
| 0.01 | 0.105(9) | | | | |
| 0 | 0.122(11) | 0.859(5) | 1.135(10) | 2.387(20) | 0.475(14) |

этапе релаксации показывают, что влияние структурного беспорядка достаточно мало и поведение неупорядоченной системы соответствует однородному случаю. Так, в работе [100] было проведено численное исследование критического поведения трехмерной однородной модели Изинга и были получены значения динамических критических индексов $\theta' = 0.108(2)$, $z = 2.041(18)$ и отношение статических индексов $\beta/\nu = 0.517(2)$.

Для получения итоговых значений критических показателей на участке влияния структурной неупорядоченности, к результатам моделирования высокотемпературного начального состояния была применена процедура учета ведущей поправки к скейлингу, описанная в 2.4.1. Итоговые полученные значения критических показателей для слабо неупорядоченной системы приведены в таблице 2.4.

Таблица 2.4: Значения критических показателей слабо неупорядоченной системы с учетом поправок к скейлингу

| Показатель | Значение | $\omega/z$ |
|---|---|---|
| $\theta'(m_0 = 0.03)$ | $0.104(12)$ | $0.074$ |
| $\theta'(m_0 = 0.02)$ | $0.117(10)$ | $0.068$ |
| $\theta'(m_0 = 0.01)$ | $0.118(10)$ | $0.096$ |
| $\theta'(m_0 \to 0)$ | $0.127(16)$ | $0.079$ |
| $c_2(m_0 \to 0)$ | $0.909(4)$ | $0.112$ |
| $c_a(m_0 \to 0)$ | $1.242(10)$ | $0.160$ |
| $z$ | $2.191(21)$ | |
| $\beta/\nu$ | $0.504(14)$ | |
| $(\omega/z)_{av}$ | $0.117(24)$ | |
| $(\omega)_{av}$ | $0.256(55)$ | |

## 2.6 Анализ результаты и выводы

В данной главе было осуществлено численное моделирование структурно-неупорядоченной ферромагнитной модели Изинга в присутствии точечных немагнитных дефектов для спиновых концентраций $p = 0.95$ и $p = 0.8$, лежащих выше порога примесной перколяции, в критической точке. Моделирование проводилось как из низкотемпературного начального состояния $m_0 = 1$, так и высокотемпературного $m_0 \ll 1$. Проведено исследование влияния неравновесных начальных состояний системы, характеризующихся малыми значениями начальной намагниченности $m_0 \ll 1$, на критическую релаксацию структурно-неупорядоченной системы в коротковременном режиме.

Проведенные исследования намагниченности $m(t)$, ее логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2(t)$ в случае низкотемпературного начального состояния, а также автокорреляционной функции $C(t)$ и второго момента намагниченности - для высокотемпературного начального состояния показали, что в отличие от однородной системы, в слабо неупорядоченных системах может быть выявлено два универсальных динамических критических режима. А именно, на раннем временном интервале реализуется релаксационное поведение, соответствующее поведению однородной системы, и лишь затем, проходя через режим кроссоверного поведения, реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы. Сравнение полученных критических показателей табл. 2.3 на начальном этапе критической эволюции демонстрирует их хорошее соответствие с результатами численного исследования трехмерной однородной модели Изинга, проведенного в работе [100].

В таблице 2.5 проводится сравнение критических показателей неупорядоченной системы, полученных в данной главе, с другими теоретическими, численными и экспериментальными исследованиями, а также с результатами моделирования однородной модели Изинга.

Таблица 2.5: Результаты исследований критического поведения слабо неупорядоченной модели Изинга (МК - компьютерное моделирование методами Монте-Карло, РГ - аналитическое исследование методами ренормализационной группы или теоретико-полевыми методами, ЭКСП - результаты эксперимента).

| Источник | $p$ | $\theta'$ | $z$ | $\beta$ | $\nu$ | $\beta/\nu$ | $\omega$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Низкотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация | 0.95 | | 2.185(25) | 0.356(6) | 0.668(14) | 0.522(13) | 0.369(96) |
| Диссертация | 0.8 | | 2.208(32) | 0.348(11) | 0.685(21) | 0.508(17) | 0.404(110) |
| Высокотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация | 0.8 | 0.127(16) | 2.191(21) | | | 0.504(14) | 0.256(55) |
| Результаты других работ | | | | | | | |
| Jaster (МК) [100] | 1 | 0.108(2) | 2.042(6) | 0.327(2) | 0.633(2) | 0.517(2) | |
| Прудников (МК) [25] | 0.95 | | 2.190(70) | | | | |
| | 0.8 | | 2.200(80) | | | | |
| | 0.6 | | 2.580(90) | | | | |
| | 0.4 | | 2.650(120) | | | | |
| Heuer (МК) [101, 102] | 0.95 | | 2.160(10) | 0.310(20) | 0.640(20) | 0.490(20) | |
| | 0.90 | | 2.232(4) | 0.310(20) | 0.650(20) | 0.480(20) | |
| | 0.80 | | 2.380(10) | 0.350(20) | 0.680(20) | 0.510(20) | |
| | 0.60 | | 2.930(30) | 0.330(20) | 0.720(20) | 0.450(20) | |
| Pelisetto (РГ) [103] | | | | 0.349(5) | 0.678(10) | 0.515(15) | |
| Прудников (РГ) [62] | | | 2.1792(13) | | | | |
| Прудников (РГ) [104] | | 0.120 | | | | | |
| Муртазаев (МК) [105, 106] | 0.95 | | | 0.306(3) | 0.646(2) | | |
| | 0.9 | | | 0.308(3) | 0.664(3) | | |
| | 0.8 | | | 0.310(3) | 0.683(4) | | |
| | 0.6 | | | 0.349(4) | 0.725(6) | | |
| Shehr (МК) [107] | $0.49-0.8$ | 0.10(2) | | | | | |
| Oerding (РГ) [108] | | 0.0867 | | | | | |
| Parisi (МК) [59] | $0.4-0.9$ | | 2.62(6) | | | | 0.50(13) |
| Hasenbusch (МК) [60] | 0.8; 0.65 | | 2.350(20) | | | | |
| Rosov (ЭКСП) $Fe_pZn_{1-p}F_2$ [61, 109] | 0.9 | | 2.18(10) | | | | |
| | 0.9 | | | 0.350(9) | | | |

Как следует из представленных результатов, значения критических индексов слабо неупорядоченной системы на этапе влияния структурного беспорядка существенно отличаются от однородной системы [100]. Стоит отметить, что показатели системы, полученные для различных начальных состояний - низкотемпературного $m_0 = 1$ и высокотемпературного $m_0 \ll 1$ - демонстрируют хорошее совпадение в пределах погрешности измерений.

В работе [108] было исследовано влияние некоррелированных замороженных дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения в рамках метода $\epsilon$-разложения. В рамках двухпетлевого приближения, для систем, описываемых однокомпонентным параметром порядка, было получено значение критического показателя $\theta' \approx 0.0868\epsilon$.

В работе [104] было проведено теоретико-полевое описание слабо неупорядоченной модели Изинга и при применении метода суммирования Паде-Бореля-Лероя был рассчитан динамический критический индекс $\theta' = 0.120$.

В работе [107] была численно исследована трехмерная модель Изинга методом коротковременной динамики при изменении концентрации точечных дефектов в широкой области и получено универсальное значение индекса $\theta' = 0.10(2)$. для концентраций спинов $p = 0.8, 0.65, 0.6$ и $0.49$. Полученное в указанной работе значение показателя роста намагниченности $\theta' = 0.10(2)$ в пределах погрешностей хорошо согласуется как с аналитическим значением работы $\theta' \approx 0.0868\epsilon$ [108], так и полученным в данной диссертации знаечнием $\theta' = 0.127(16)$. Однако в работе [107] для определения показателя $\theta'$ было использовано только одно значение начальной намагниченности с $m_0 = 0.01$. В то время как, согласно работе [100], наиболее правильно было бы находить показатель $\theta'$ в асимптотическом пределе $m_0 \to 0$. Кроме того, при анализе данных намагниченности для систем с различными спиновыми концентрациями, применялась методика учета ведущей поправки к скейлингу с единым значением динамического критического индекса $z \approx 2.62$ [59]. Однако, данное значение индекса $z$ не соответствует как аналитическому значению $z = 2.1792(13)$, полученному в рамках теоретико-полевого подхода в трехпетлевом приближении [62], так и значению $z = 2.18(10)$, экспериментально измеренному в слабо неупорядоченном изинговском магнетике $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$ [61]. Все это ставит под сомнение корректность полученного значения показателя $\theta' = 0.10(2)$ и позволяет рассматривать его значение как предварительное для последующих более точных исследований.

Результаты представленных в данной главе исследований позволяют сделать вывод, что для слабо неупорядоченных систем реальными являются значения динамических критических показателей $\theta' = 0.127(16)$ и $z = 2.191(21)$, оказывающиеся выше значений $\theta' = 0.108(2)$, $z = 2.042(6)$ для однородных изинговских систем. Таким образом, слабо неупорядоченные системы с концентрациями примесей выше порога примесной перколяции демонстрируют новый класс универсальности критического поведения, отличный от случая бездефектных систем.

# Глава 3

# Численное моделирование сильно неупорядоченной модели Изинга

## 3.1 Введение

Численные исследования и реномргрупповой анализ с использованием методов $\varepsilon$–разложения и теоретико-полевого описания показали, что в области малой концентрации немагнитных примесей, критическое поведение изингоподобных систем с некоррелированными дефектами структуры характеризуется новым набором критических показателей. Причем этот набор индексов не зависит от спиновой концентрации в области слабого разбавления. Стоит отметить, что на сегодня существующие аналитические методы не могут дать ответ о влиянии увеличения разбавления магнетика немагнитными примесями в области сильного разбавления.

Что же происходит при увеличении концентрации примесей? Известно, что существует такая пороговая концентрация $p_c^{(sp)}$, ниже которой отсутствует конечная температура фазового перехода, то есть $T_c(p \leq p_c^{(sp)}) = 0$. Эта величина получила название спинового порога перколяции. Согласно теории перколяции, при концентрациях спинов выше $p_c^{(sp)}$ в системе существует спиновый протекающий кластер. В случаи наличия дефектов структуры определяют обратную величину, называемую порогом примесной перколяции $p_c^{(imp)} = 1 - p_c^{(sp)}$. При спиновых концентрациях $p_c^{(sp)} < p < p_c^{(imp)}$

даже случайно распределенные примеси могут образовывать связывающий кластер, сосуществующий вместе со спиновым кластером. В системе образуется фракталоподобная структура с эффективной дальнодействующей пространственной корреляцией в распределении дефектов [110]. До сих пор открытым вопросом остается проблема влияния этого примесного порога $p_c^{(imp)}$ на критическое поведение структурно неупорядоченных систем. В работах [14, 25] была предложена теория ступенчатой универсальности критического поведения, согласно которой область концентраций $p_c^{(sp)} < p < p_c^{(imp)}$ образует новый тип критического поведения, соответствующий области сильной структурной неупорядоченности. Для трехмерной модели Изинга с короткодействующим взаимодействием ближайших соседей соответствующие пороги перколяции оцениваются следующими значениями: $p_c^{(sp)} \approx 0.31$ и $p_c^{(imp)} \approx 0.69$.

Предыдущие исследования Монте-Карло не дают однозначного ответа о зависимости или независимости критических показателей от концентрации дефектов в случаях их сильного разбавления. Так, в работе [107] был произведен расчет критического показателя возрастания намагниченности $\theta'$ для диапазона концентраций $p = [0.49..0.8]$. Полученное значение $\theta'(m_0 = 0.01) = 0.01$ для всех концентраций. Однако в работе [107] имели место методические неточности, подробно разобранные в заключении главы 2.6.

Настоящая глава посвящена численному исследованию неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 0.6$ и $0.5$ методом коротко временной динамики. Высокая статистика исследования, методика учета скейлинговых поправок - все это позволяет считать, что полученные результаты носят уникальный характер.

## 3.2 Оссобенности моделирования сильно неупорядоченных систем

В данной главе диссертационной работы рассматривается коротковременной режим неравновесной критической эволюции трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. Ее определяется выражением (2.10)

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j S_i S_j. \tag{3.1}$$

Исследование сильно неупорядоченных систем проводилось посредством метода коротковременной динамики (2.2) на системах со спиновыми концентрациями $p = 0.6, 0.5$, лежащими ниже порога примесной перколяции.

При моделировании МКД возможен выбор двух типов начальных состояний, а именно состояние с начальной намагниченностью $m_0 = 1$ или $m_0 \ll 0$. Первое из них называют низкотемпературным начальным состоянием, поскольку система из одинаково ориентированных спинов соответствует основному состоянию с температурой $T = 0$. Состояние с $m_0 \ll 0$ соответствует парамагнитной фазе ферромагнетика при $T \gg T_c$ и называется высокотемпературным. В данной работе проведено исследование трехмерной модели Изинга с $p = 0.6$ и $0.5$ как в из начального состояния с $m_0 = 1$, так и из состояния с $m_0 \ll 1$.

При моделировании неравновесного критического поведения системы, характеризующегося высокотемпературным начальным состоянием, определялись временные зависимости намагниченности, ее второго момента и автокорреляционная функция (2.8) – (2.10). С помощью степенных законов (2.3) – (2.6)

$$\begin{aligned} m(t) &\sim m_0 t^{\theta'}, && (3.2)\\ m^{(2)}(t) &\sim t^{c_2}, c_2 = (d - \tfrac{2\beta}{\nu})\tfrac{1}{z} \\ C(t) &\sim t^{c_a}, c_a = \tfrac{d}{z} - \theta', && (3.3) \end{aligned}$$

определялись критические показатели $\theta', z$ и отношение $\beta/\nu$.

При исследовании релаксационного процессы из низкотемпературного начального состояния определялись временные зависимости, ее логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2(t) = \frac{M^2(t)}{(M(t))^2} - 1$. В МКД их степенные законы имеют вид:

$$\begin{aligned} m(t) &\sim t^{-\beta/\nu z} \\ \partial_\tau lnM(t) &\sim t^{1/\nu z}, \\ U_2(t) &\sim t^{d/z}. \end{aligned}$$

Таким образом, анализ указанных величин позволяет определить значения динамического критического индекса $z$ и статистических показателей $\beta$ и $\nu$.

Исследование сильно неупорядоченных систем характеризуются более сильными флуктуациями термодинамических величин, чем слабо неупорядоченная система. Для получения более точных значений критического динамического индекса $z$, наряду с использованием показателей $\theta'$ и $c_a$ (3.2), использовался способ, предложенный в работе [111]. В указанной работе было предложено рассчитывать кумулянт $F_2$, определяемого следующим выражением

$$F_2(t) = \frac{M^2(t)|_{m_0=0}}{(M(t)|_{m_0=1})^2}. \tag{3.4}$$

Его характерной особенностью является использование данные об эволюции намагниченности из различных начальных состояний - низкотемпературного с $m_0 = 1$ и высокотемпературного с $m_0 \ll 1$. В методе коротковременной динамики в критической точке данный кумулянт $F_2$ имеет следующую временную зависимость:

$$F_2(t) \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)\frac{1}{z}}}{t^{-2\beta/\nu}} \sim t^{-d/z}. \tag{3.5}$$

Расчет кумулянта 3.4 использовался для непосредственного определения критического показателя $z$.

## 3.3 Детали моделирования

В данной работе моделирование проводилось на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ для концентраций спинов $p = 0.6$ и $0.5$. Для уменьшения влияния конечного размера системы на решетке задавались периодические граничные условия. Была исследована релаксация как из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$, так и из низкотемпературного с $m_0 = 1$. Динамическая эволюция моделировалась посредством алгоритма Метрополиса.

Вычисление намагниченности и автокорреляционной функции осуществлялось по формулам:

$$m(t) = \left[ \left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i}^{pL^3} p_i S_i(t) \right\rangle \right], \tag{3.6}$$

$$C(t) = \left[ \left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i}^{pL^3} p_i S_i(t) S_i(0) \right\rangle \right], \tag{3.7}$$

в которых угловые скобки означают статистическое усреднение по реализациям начального состояния с малой намагниченностью, а квадратные скобки - усреднение по различным примесным конфигурациям для требуемой концентрации дефектов $p$.

Поведение сильно неупорядоченных систем исследовалось на временах до $3000 MCS/s$. Использовались критические температуры, полученные в работе [96]:

$$\begin{aligned} p = 0.5, T_c = 1.84509(6) \\ p = 0.6, T_c = 2.42413(9). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Статистика исследования составила $10000$ примесных конфигураций, при этом каждая примесная конфигурация дополнительно усреднялась по 25 прогонкам - для получения статистического усреднения по реализации динамической эволюции.

## 3.4 Вычисление критических показателей сильно неупорядоченной модели Изинга

### 3.4.1 Низкотемпературное начальное состояние

При моделировании систем из состояния с начальной намагниченностью $m_0 = 1$ осуществлялось вычисление намагниченности $m(t)$, ее логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2$. Анализ временных зависимостей указанных величин позволяет определить критические показатели $\beta, \nu$ и $z$ в соответствие с формулами (3.4). На рисунке 3.1 представлена временная зависимость намагниченности при моделировании из низкотемпературного начального состояния для систем со спиновой концентрацией $p = 0.5$ и $p = 0.6$ в двойном логарифмическом масштабе. Данные кривые были использованы для определения значений показателя $\beta/\nu z$,.

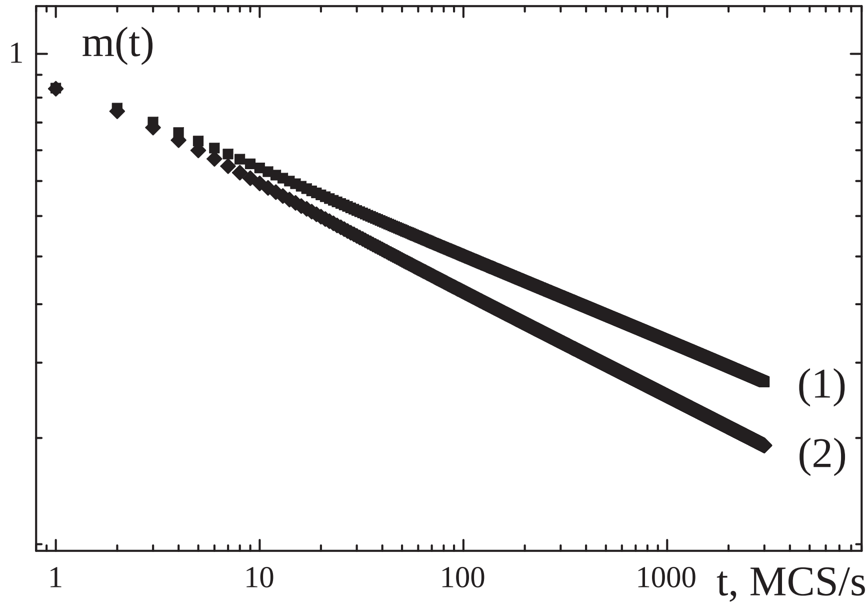


Рисунок 3.1: Временная эволюция намагниченности для спиновых концентраций $p = 0.5$ (1) и $p = 0.6$ (2) при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$.

В отличии от неупорядоченных систем, анализ различных термодинамических характеристик, таких как намагниченность, кумулянт $U_2$ или автокорреляционная функция, не выявил существование отдельного универсального этапа критической эволюции, на котором поведение системы соответствовало бы однородной модели. На рисунках 3.2 и 3.3 демонстрируются полученные временные зависимости логарифмической производной $\partial_\tau lnM(t)$ и кумулянта $U_2(t)$ в двойном логарифмическом масштабе. Поученные временные зависимости использовались для получения значений показателей $1/\nu z$ и $d/z$.

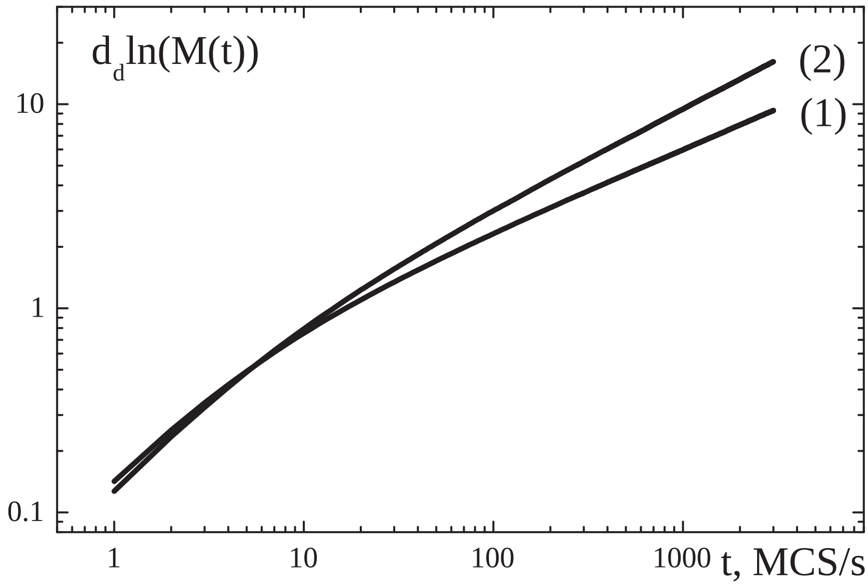


Рисунок 3.2: Временная эволюция $\partial_\tau lnM(t)$ для спиновых концентраций $p = 0.5$ (1) и $p = 0.6$ (2) при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$.

Система при своей эволюции из начального неравновесного состояния, созданного при $T \gg T_c$, к критическому состоянию при $T_c$ проходит после $t_{\rm mic}$ последовательную серию промежуточных состояний в критической области, а именно от состояний, контролируемых неподвижной точкой для однородных систем в температурной области $|T - T_c(p)|/T_c(p) > [\Delta J(p)/J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, к состояниям, контролируемым неподвижной точкой для неупорядоченных систем, в температурной области $|T - T_c(p)|/T_c(p) > [\Delta J(p)/J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, где $\Delta J(p)$ – характеризует влияние дефектов структуры на величину случайности в обменном взаимодействии спиновых систем со спиновой концентрацией $p$, $J_0(p)$ – средняя величина обменного взаимодействия, $\alpha_0$ – критический индекс для теплоемкости однородной системы, который для некоррелированных дефектов структуры совпадает с индексом кроссовера $\phi$, определяющим влияние структурного беспорядка на критические свойства системы.

Величина $\Delta J(p) \sim c_{\rm imp} = 1 - p$, где $c_{\rm imp}$ – концентрация дефектов. Поэтому для слабо неупорядоченных состояний температурная область вблизи критической температуры $|T - T_c(p)|/T_c(p) > [\Delta J(p)/J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, где характеристики критического поведения неупорядоченных систем определяются

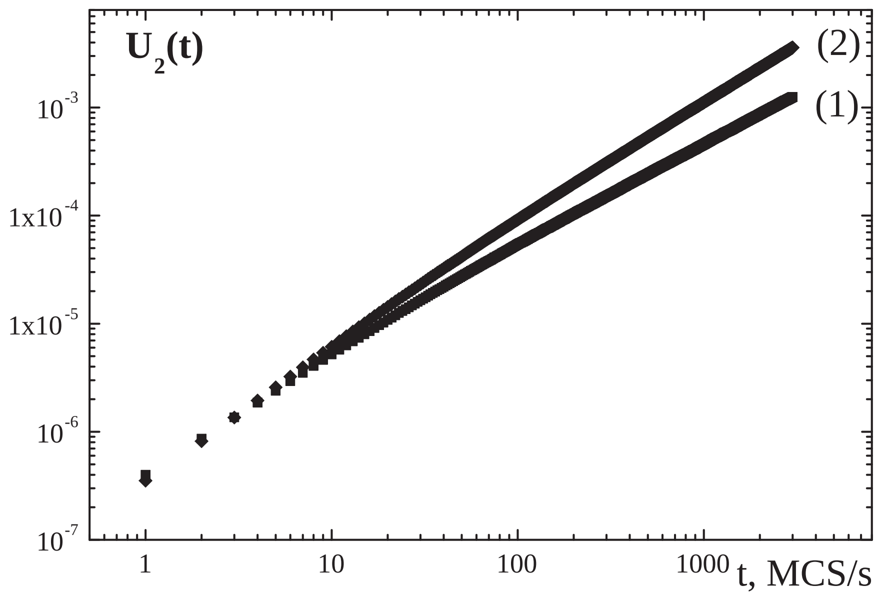


Рисунок 3.3: Временная эволюция $U_2(t)$ для спиновых концентраций $p = 0.5$ (1) и $p = 0.6$ (2) при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$.

критическими индексами однородной системы, является достаточно широкой, в то время как для сильно неупорядоченных систем – узкой. Поэтому в неравновесном критическом поведении слабо неупорядоченных систем наблюдаются переходные режимы от критического поведения однородных систем к режиму критического поведения структурно неупорядоченных систем, а для сильно неупорядоченных систем такие переходные режимы практически не наблюдаемы.

Для получения итоговых критических показателей была применена процедура учета ведущей поправки к скейлингу, введенная в 2.4.1. Полученные данные аппроксимировались выражением

$$X(t) = t^{\delta}(A + Bt^{-\omega/z}), \tag{3.9}$$

где $\delta$ - показатель анализируемой величины, $\omega$ - критический индекс поправки к скейлингу. С помощью метода наименьших квадратов определялись пары $[\delta; \omega/z]$, обеспечивающие минимальную аппроксимационную погрешность. Итоговые значения критических показателей с учетом ведущей поправки на скейлинг, полученные при моделировании из низкотемпературного начального состояния приведены в таблице 3.1. Вычисленные значе-

Таблица 3.1: Значения критических показателей сильно неупорядоченной системы с учетом поправок к скейлингу. $m_0 = 1$.

| Показатель | $p = 0.5$ | $p = 0.6$ |
|---|---|---|
| $\beta$ | $0.314(28)$ | $0.354(30)$ |
| $\nu$ | $0.711(47)$ | $0.707(46)$ |
| $z$ | $2.655(55)$ | $2.560(41)$ |
| $\beta/\nu$ | $0.442(30)$ | $0.501(32)$ |
| $(\omega/z)_{av}$ | $0.105(18)$ | |

ния критических индексов демонстрируют хорошее согласие между собой в пределах погрешностей для систем с концентрациями спинов $p = 0.6$ и $p = 0.5$.

### 3.4.2 Высокотемпературное начальное состояние

При моделировании из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$ производилось вычисление намагниченности, ее второго момента, автокорреляционной функции и кумулянта $F_2$. Используя скейлинговые соотношения (3.2) и (3.5), рассчитывались динамические критические показатели $\theta'$ и $z$, а также отношение статических критических индексов $\beta/\nu$.

Для получения динамического критического индекса $\theta'$ (2.3), (3.2) использовались следующие значения начальной намагниченности системы: $m_0 = 0.0005, 0.001$ и $0.005$ для спиновой концентрации $p = 0.6$ и $m_0 = 0.0005, 0.0075$ и $0.001$ - для $p = 0.5$. Уменьшение начальных значений намагниченности $m_0$ для сильно неупорядоченных систем, в сравнении со слабо неупорядоченным случаем 2.5 из главы 2, обусловлено необходимостью скомпенсировать уменьшение интервала эволюции намагниченности $t_{cr} \sim m_0^{-1/(\theta'+\beta/\nu)}$, вызванного изменившимся в большую сторону значением динамического индекса $z$ для сильно неупорядоченных систем по сравнению со слабо неупорядоченными системами.

На рисунках 3.4 ($p = 0.6$) и 3.5 ($p = 0.5$) в двойном логарифмическом масштабе представлены полученные временные зависимости для намагниченности при моделировании из высокотемпературного начального состояния для различных спиновых концентраций. Данные кривые позволяют

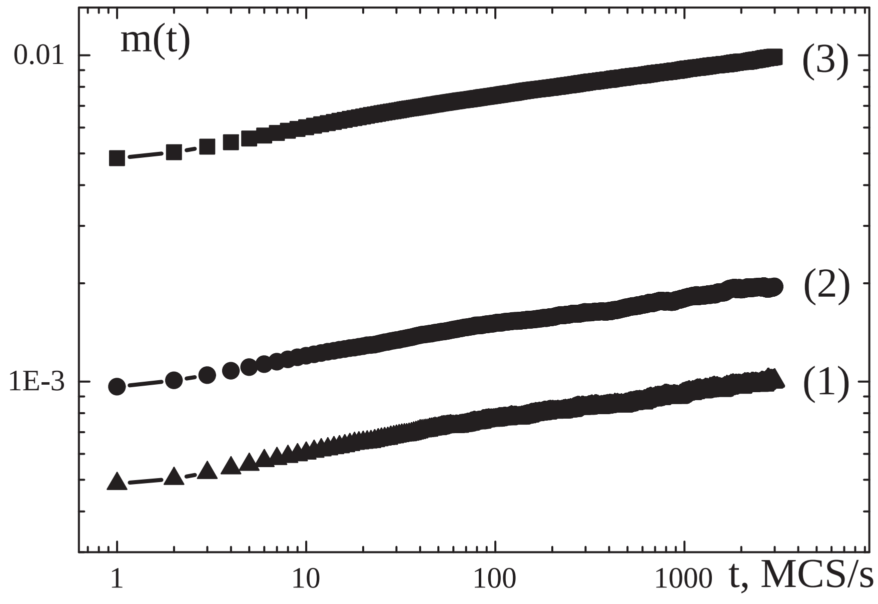


Рисунок 3.4: Временная зависимость намагниченности для спиновой концентрации $p = 0.6$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$. $m_0 = 0.0005(1), 0.001(2)$ и $0.005(3)$.

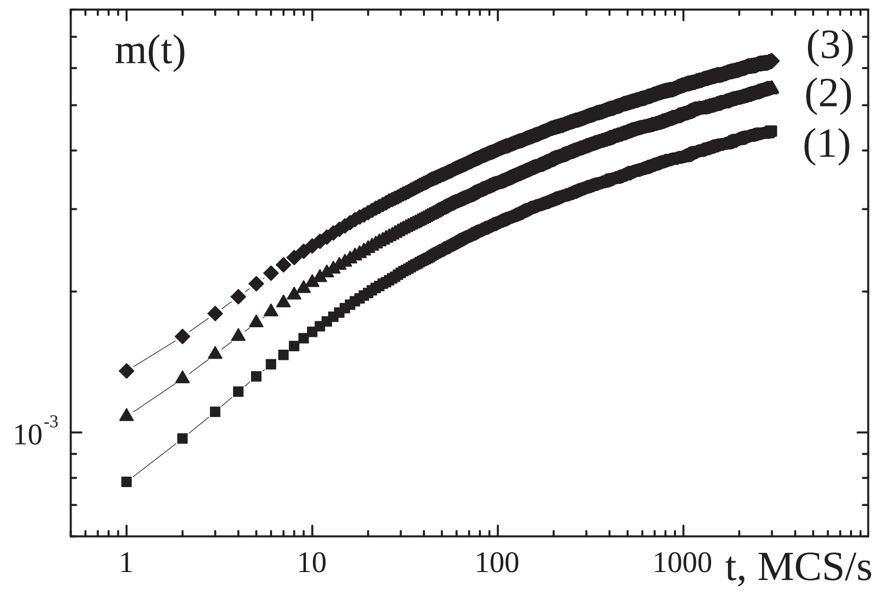


Рисунок 3.5: Временная зависимость намагниченности для спиновой концентрации $p = 0.5$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$. $m_0 = 0.0005(1), 0.0075(2)$ и $0.001(3)$.

определять показатели $\theta'(m_0)$ и их асимптотическое значение $\theta'(m_0 \to 0)$ на основе линейной аппроксимации значений $\theta'(m_0)$ при $m_0 \to 0$ (3.2).

Был осуществлен расчет автокорреляционной функции (3.7) и второго момента намагниченности. Для получения данных величин моделирование проводилось из высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0.0001$ для системы со спиновой концентрацией $p = 0.6$, и из $m_0 = 0.00001$ – для системы с $p = 0.5$. На рисунке (3.6) приведена временная зависимость автокорреляционной функции в двойном логарифмическом масштабе для исследуемых сильно неупорядоченных систем. Используя скейлинговые зависимости (3.2), были получены значения показателя $c_a = \frac{d}{z} - \theta'$. Вместе с определением асимптотического критического индекса $\theta'(m_0 \to 0)$, это позволило рассчитать динамический критический индекс $z$. Динамическая

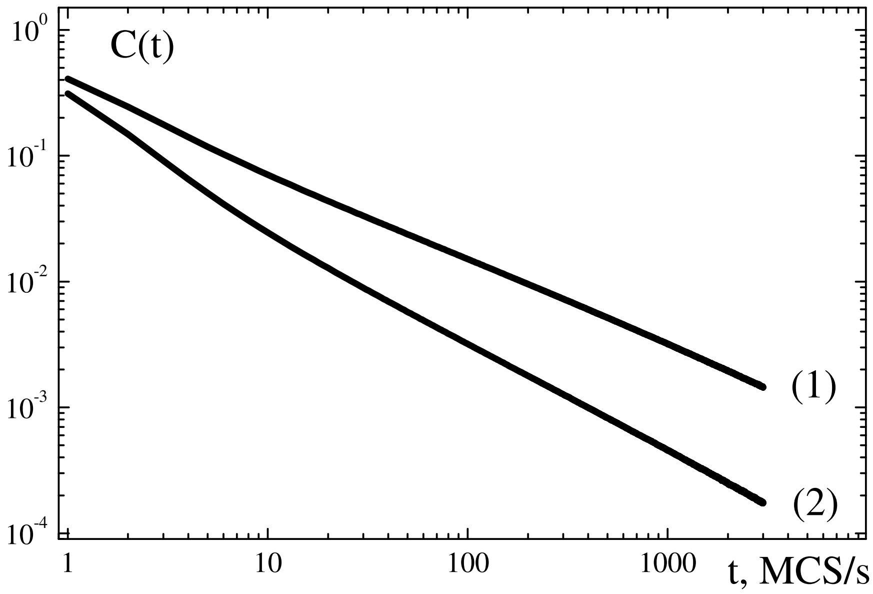


Рисунок 3.6: Временная зависимость автокорреляционной функции при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$. (1)- $p = 0.5$, (2) - $p = 0.6$.

эволюция второго момента намагниченности для систем с концентрацией спинов $p = 0.6$ и $p = 0.5$ демонстрируется на рис. 3.7 в двойном логарифмическом масштабе. Из полученной временной зависимости, были расчитаны показатели $c_2 = (d - \frac{2\beta}{\nu})\frac{1}{z}$ (3.2). Используя вычисленный при анализе автокорреляционной функции динамический индекс $z$, это позволило определить отношение статических критических показателей $\beta/\nu z$.

Вычисленный динамический критический индекс $z$ является очень важной характеристикой системы, поскольку определяет скорость релаксации

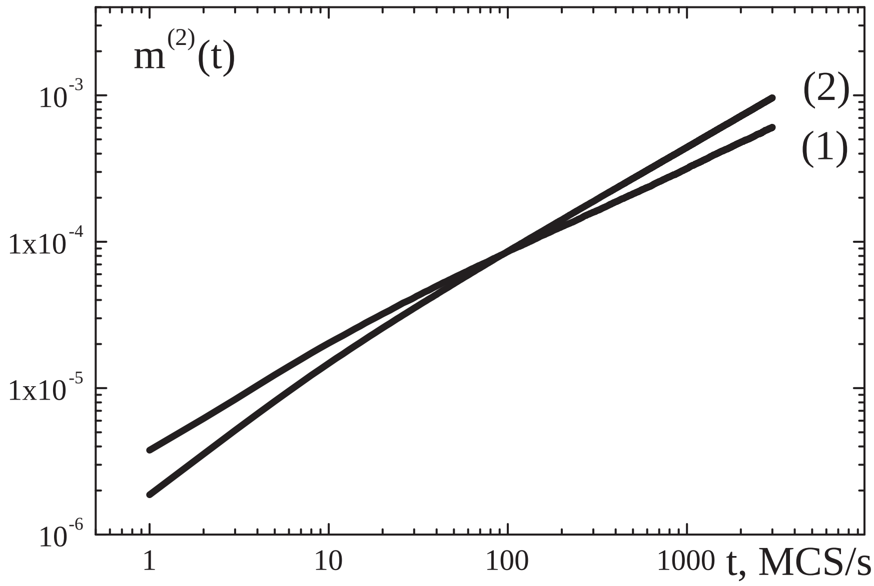


Рисунок 3.7: Временная зависимость второго момента намагниченности при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$. $(1)$- $p = 0.5$, $(2)$ - $p = 0.6$.

системы к равновесному состоянию в окрестности критической точки $T_c$. В тоже время, его получение из анализа автокорреляционной функции и роста намагниченности включает в себя погрешность в определении обоих показателей - $\theta'(m_0 \to 0)$ и $c_a$. Для подтверждения полученных результатов, был осуществлен расчет кумулянта $F_2(t)$ [111], введенного в разделе 3.2. При его вычислении были использованы данные для намагниченности, полученные при моделировании низкотемпературного начального состояния в разделе 3.4.1, и данные для второго момента намагниченности, полученные при моделировании из высокотемпературного начального состояния. Его временная зависимость для рассматриваемых спиновых концентраций приведена на рисунке 3.8 в двойном логарифмическом масштабе. Степенная зависимость кумулянта $F_2(t)$ определяется показателем $-d/z$ (3.8). Анализируя полученные кривые, были определены динамические критические индексы $z$ для систем со спиновой концентрацией $p = 0.6$ и $p = 0.5$.

Для получения итоговых критических показателей, к результатам полученным при моделировании сильно неупорядоченных систем была применена процедура учета ведущей поправки к скейлингу, описанная в разделе 3.9. Для анализа скейлинговых поправок был использован интервал

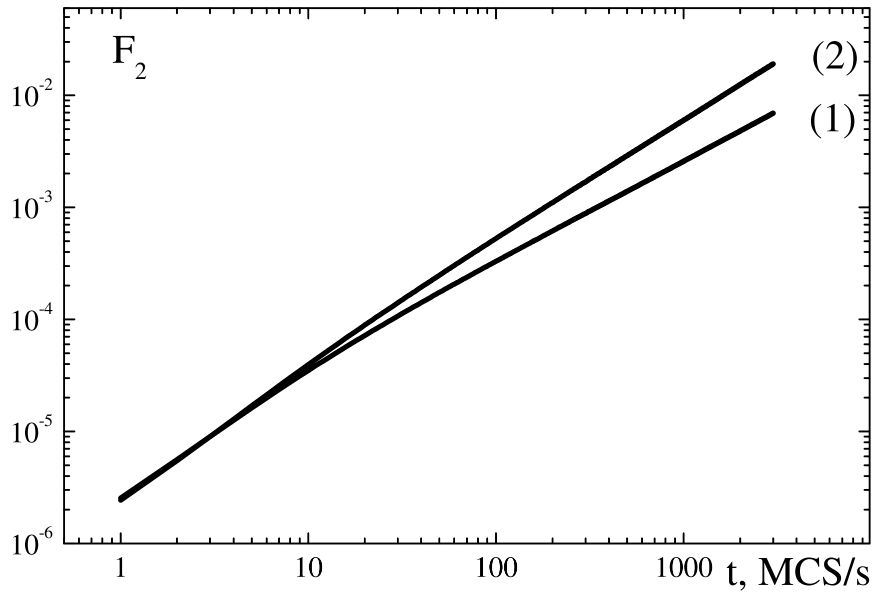


Рисунок 3.8: Временная зависимость кумулянта $F_2$ при моделировании из начального состояния с $m_0 = 1$. (1)- $p = 0.5$, (2) - $p = 0.6$.

от $[500 - 3000]$ шагов Монте-Карло на спин. Итоговые значения критических индексов, полученных при моделировании из высокотемпературного начального состояния, приведены в таблице 3.2. Поскольку динамические индексы $z$, полученные при анализе кумулянта $F_2(t)$ имеют существенно меньшую погрешность, но при этом находятся в пределах погрешности вычислений с индексами, определенными из анализа показателей $\theta'$ и $c_a$, в качестве итоговых значений, полученных при исследовании динамики системы из высокотемпературного начального состояния, были использованы результаты моделирования $F_2(t)$. Полученные значения показателей де-

Таблица 3.2: Значения критических показателей сильно неупорядоченной системы с учетом поправок к скейлингу. $m_0 \ll 1$.

| Показатель | $p = 0.5$ | $p = 0.6$ |
|---|---|---|
| $\theta'$ | $0.192(26)$ | $0.194(41)$ |
| $z(c_a + \theta')$ | $2.736(97)$ | $2.756(113)$ |
| $z(F_2)$ | $2.647(49)$ | $2.627(41)$ |
| $\beta/\nu$ | $0.430(53)$ | $0.479(58)$ |
| $(\omega/z)_{av}$ | $0.144(44)$ | |

монстрируют хорошее соответствие в рамках погрешностей для структурно неупорядоченных систем с концентрациями спинов $p = 0.6$ и $p = 0.5$.

## 3.5 Анализ результатов и выводы

В рамках данной главы было проведено численное исследование критической динамики трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 0.6$ и $p = 0.5$, лежащих ниже порога примесной перколяции $p_c^{(imp)} \approx 0.69$. Исследование проводилось на коротковременном режиме неравновесной эволюции. Показано, что увеличение концентрации структурных примесей приводят к усилению эффектов критического замедления по сравнению со случаем слабо неупорядоченных систем.

Как показали проведенные численные исследования термодинамических характеристик сильно неупорядоченных систем, в их поведении, в отличие от случая слабо неупорядоченных систем, не наблюдается динамического режима с характеристиками однородной системы. В таблице 3.2 проводится сравнение критических показателей неупорядоченной системы, полученных в данной главе, с другими теоретическими, численными и экспериментальными исследованиями, а также с результатами моделирования однородной модели Изинга.

Сопоставление рассчитанных значений $\theta^{'}(p = 0.6) = 0.194(41)$ и $\theta^{'}(p = 0.5) = 0.192(26)$ со значением $\theta^{'} = 0.10(2)$ из работы [107], полученным для систем с различными спиновыми концентрациями, но одинаковыми начальными значениями намагниченности $m_0 = 0.01$, показывает их расхождение друг с другом. С другой стороны, согласно работе [100], необходимо выделение асимптотического значения $\theta'(m_0 \to 0)$. Также полученное асимптотическое при $m_0 \to 0$ значение $\theta^{'}$ оказывается выше, чем $\theta^{'}(m_0 = 0.01)$ из [107]. Это объясняется выявленной тенденцией, что $\theta^{'}(m_0^{(2)}) > \theta^{'}(m_0^{(1)})$, если начальные намагниченности систем находятся в следующем соответствии друг с другом $m_0^{(2)} < m_0^{(1)}$. Таким образом, декларируемое в [107] хорошее согласие найденного показателя $\theta^{'} = 0.10(2)$ со значением $\theta^{'} = 0.0867$, полученным в [108] на основе применения метода $\varepsilon$-разложения в двухпетлевом ренормгрупповом описании, оказывается неубедительным.

Таблица 3.3: Результаты исследований критического поведения неупорядоченной модели Изинга (МК - компьютерное моделирование методами Монте-Карло, РГ - аналитическое исследование методами ренормализационной группы или теоретико-полевыми методами, ЭКСП - результаты эксперимента).

| Источник | $p$ | $\theta'$ | $z$ | $\beta$ | $\nu$ | $\beta/\nu$ | $\omega/z$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Слабо неупорядоченные системы | | | | | | | |
| Низкотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация. Глава 2 | 0.95 | | 2.185(25) | 0.356(6) | 0.668(14) | 0.522(13) | 0.169(91) |
| Диссертация. Глава 2 | 0.8 | | 2.208(32) | 0.348(11) | 0.685(21) | 0.508(17) | 0.183(108) |
| Высокотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация. Глава 2 | 0.8 | 0.127(16) | 2.191(21) | | | 0.504(14) | 0.117(24) |
| Сильно неупорядоченные системы | | | | | | | |
| Низкотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация. Глава 3 | 0.6 | | 2.560(41) | 0.354(30) | 0.707(46) | 0.501(32) | 0.105(18) |
| Диссертация. Глава 3 | 0.5 | | 2.655(55) | 0.314(28) | 0.711(47) | 0.442(30) | 0.105(18) |
| Высокотемпературное начальное состояние | | | | | | | |
| Диссертация. Глава 3 | 0.6 | 0.194(41) | 2.627(41) | | | 0.479(58) | 0.144(44) |
| Диссертация. Глава 3 | 0.5 | 0.192(26) | 2.647(49) | | | 0.430(53) | 0.144(44) |
| Результаты других работ | | | | | | | |
| Jaster (МК) [100] | 1 | 0.108(2) | 2.042(6) | 0.327(2) | 0.633(2) | 0.517(2) | |
| Heuer (МК) [101,102] | 0.95 | | 2.160(10) | 0.310(20) | 0.640(20) | 0.490(20) | |
| | 0.90 | | 2.232(4) | 0.310(20) | 0.650(20) | 0.480(20) | |
| | 0.80 | | 2.380(10) | 0.350(20) | 0.680(20) | 0.510(20) | |
| | 0.60 | | 2.930(30) | 0.330(20) | 0.720(20) | 0.450(20) | |
| Shehr (МК) [107] | $0.49-0.8$ | 0.10(2) | | | | | |
| Pelisetto (РГ) [103] | | | | 0.349(5) | 0.678(10) | 0.515(15) | |
| Прудников (РГ) [62] | | | 2.1792(13) | | | | |
| Прудников (РГ) [104] | | 0.120 | | | | | |
| Oerding (РГ) [108] | | 0.0867 | | | | | |
| Shehr (МК) [107] | $0.49-0.8$ | 0.10(2) | | | | | $\approx 0.23$ |
| Parisi (МК) [59] | $0.4-0.9$ | | 2.62(6) | | | | $\approx 0.191$ |
| Hasenbusch (МК) [60] | $0.8-0.65$ | | 2.350(20) | | | | |
| Муртазаев (МК) [105,106] | 0.95 | | | 0.306(3) | 0.646(2) | | |
| | 0.9 | | | 0.308(3) | 0.664(3) | | |
| | 0.8 | | | 0.310(3) | 0.683(4) | | |
| | 0.6 | | | 0.349(4) | 0.725(6) | | |
| Прудников (МК) [25] | 0.95 | | 2.190(70) | | | | |
| | 0.8 | | 2.200(80) | | | | |
| | 0.6 | | 2.580(90) | | | | |
| | 0.4 | | 2.650(120) | | | | |
| Rosov (ЭКСП) $Fe_pZn_{1-p}F_2$ [61,109] | | 2.18(10) | 0.350(9) | | | | |

В работе [60] было проведено численное исследование равновесной динамики неупорядоченной модели Изинга с некоррелированными дефектами для спиновых концентраций $p = 0.8,\ 0.85$ и $0.65$. При использовании конечномерного скейлингового анализа для решеток с $L_{min} = 12 < L \leq 64$ было получено значение критического показателя $z = 2.35(2)$ для системы с концентрацией спинов $p = 0.8$. Исследование других спиновых концентраций не позволило определить индекс $z$ с удовлетворительной точностью. В тоже время, для системы с $p = 0.8$ было проведено исследование неравновесной критический релаксации. Предполагая отсутствие ведущей поправки к скейлингу, авторы получили значение показателя $z = 2.35(2)$ в точности совпадающем с результатом равновесного исследования. Однако, в работе [96] было показано, что конечномерный скейлинговый анализ требует по меньшей мере 6 точек (различных размеров решетки), тогда как в работе [60] было использовано 4 или 5 точек для различных величин. Кроме того, полученное значение $z = 2.35(2)$ плохо согласуется с известным результатом эксперимента $z = 2.18(10)$, полученным при исследовании изингоподобного разбавленного антиферромагнетика $Fe_pZn_{1-p}F_2$ при спиной концентрации $p = 0.9$ [61] (значение $z$ приведено в таблице 3.3).

Полученные в данной главе значения критических показателей при моделировании критического поведения систем из высокотемпературного и низкотемпературного начальных состояний находятся в хорошем согласии друг с другом. Сравнение динамических индексов $\theta' = 0.127(16)$ и $z = 2.191(21)$, полученных во второй главе настоящей диссертации при исследовании высокотемпературного начального состояния для слабо неупорядоченной системы со спиновой концентрацией $p = 0.8$, показывает их существенное различие в пределах погрешности измерений со значениями $\theta' = 0.194(41)$ и $z = 2.627(41)$, полученными при исследовании сильно неупорядоченной системы с $p = 0.6$, и со значениями $\theta' = 0.192(26)$ и $z = 2.647(49)$ для $p = 0.5$. Поскольку время релаксации системы определяется критическим показателем $z$: $t_{rel} \sim \tau^{-z\nu}$, полученные значения указывают на то, что сильно неупорядоченные системы характеризуются заметно более медленными релаксационными свойствами, по сравнению со слабо неупорядоченными системами.

Таким образом, неравновесное критическое поведение сильно неупорядоченных систем представляет собой новый класс универсальности, отличный от классов универсальности для однородных и слабо неупорядоченных систем.

# Глава 4

# Численное исследование эффектов старения в трехмерной модели Изинга

## 4.1 Введение

В настоящее время большой научный интерес вызывают системы, характеризующиеся аномально медленной динамикой. Под медленной динамикой как правило понимаются системы с значительными или бесконечными временами релаксации. В значительной мере интерес обусловлен рядом наблюдаемых явлений, таких как критическое замедление, старение и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы. Одними из самых известных примеров систем с медленной динамикой, демонстрирующих эффекты старения, являются такие сложные неупорядоченные системы как стекла: дипольные, металлические и спиновые [37–40]. В тоже время как показали различные аналитические и численные исследования, особенности медленной динамики в неравновесной релаксации могут наблюдаться и в структурно однородных средах в критической точке или ее окрестности при фазовых переходах второго рода, так как критическая динамика таких систем характеризуется аномально большими временами релаксации [42, 112].

В критической области при фазовом переходе второго рода время релаксации системы $t_{rel}$ является расходящейся величиной $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Следовательно, в критической точке система не достигает равновесия в течении всего релаксационного процесса. На этапе релаксации $t \ll t_{\rm rel}$ и ожидается проявление эффектов старения. Они выражаются в существовании двухвременных зависимостей корреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика на внешнее возмущение $R(t, t_w)$. В случае медленной динамики данные функции зависят как от времени ожидания, или возраста системы, $t_w$, так и от времени наблюдения $t - t_w$. На этапе $t - t_w \ll t_{\rm rel}$ во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний. Для спиновой системы, характеризуемой спиновой плотностью $\S(x)$, корреляционная функция определяется выражением $(t > t_w)$

$$C\left(t,t_w\right) = \frac{1}{V}\int d^dx\big[\langle S(x,t)S(x,t_w)\rangle - \langle S(x,t)\rangle\left\langle S(x,0)\right\rangle\big], \qquad (4.1)$$

а функция отклика на малое внешнее магнитное поле $h$, приложенное к системе в момент времени $t_w$, формулой

$$R\left(t,t_w\right) = \frac{1}{V}\int d^dx\left.\frac{\delta\left\langle S(x,t)\right\rangle}{\delta h(x,t_w)}\right|_{h=0}. \qquad (4.2)$$

Время ожидания определяется временем, прошедшим с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течении $(t - t_w) \ll t_{\rm rel}$, где $t_{\rm rel}$ - время релаксации системы, во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы и эффектов старения, характеризующихся как нарушением трансляционной симметрии системы во времени, так и замедлением релаксационных и корреляционных процессов с увеличением «возраста» образца $t_w$.

Другим интересным эффектов медленной динамики является нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) [42, 45, 46, 112, 113, 115, 116] , которая связывает функцию отклика системы на внешнее возмущение и корреляционную функцию в термодинамически равновесном состоянии $t \gg t_{rel}$ посредством соотношения:

$$R(t,t_w) = \frac{1}{T}\frac{\partial C(t,t_w)}{\partial t_w}. \qquad (4.3)$$

ФДТ обобщается на случай неравновесной динамики $t, t_w \ll t_{rel}$

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \tag{4.4}$$

в котором величина $X(t, t_w)$ называется флуктуационно-диссипативным отношением (ФДО). Согласно ФДТ, в системе, достигшей состояния равновесия, $X(t, t_w) = 1$. Предельное ассимптотическое значение ФДО:

$$X^{\infty} = \lim_{t_w \to \infty} \lim_{t \to \infty} X(t, t_w) \tag{4.5}$$

используется в качестве независимой характеристики неравновесного поведения систем с медленной динамикой.

Настоящая глава посвящена исследованию эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в трехмерной неупорядоченной модели Изинга. Представлен анализ однородной (концентрация спинов $p = 1$), слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем. Впервые численно расчитано флуктуационно-диссипативное отношение для неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Это позволяет сделать вывод, что достигнутые результаты носят уникальный характер.

## 4.2 Особенности моделирования эффектов старения

В настоящей работе рассматривалась трехмерная неупорядоченная ферромагнитная модель Изинга с точечными немагнитными примесями. С учетом внешнего магнитного поля $h$ ее гамильтониан задается выражением

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j S_i S_j - \sum_i h_i S_i, \tag{4.6}$$

где $p_i$ - число, равное 1, если в узле спин, и 0 - в случае немагнитного дефекта, $S_i$ - значение спина в $i$-ом узле, $J$ - интеграл обменного взаимодействия. Моделирование эволюции системы проводилось посредством метода Монте-Карло.

При моделировании критической динамики в данной главе было использовано высокотемпературное начальное состояние системы с малым значением исходной намагниченности $m_0 \ll 1$. В этом случае, двухвременная автокорреляционная функция может быть рассчитана по формуле

$$C(t,t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3}\sum_i^{pL^3} p_i S_i(t) S_i(t_w)\right\rangle\right] . \tag{4.7}$$

Моделирование критической динамики при исследовании поведения автокорреляционной функции осуществлялось с использованием алгоритма Метрополиса.

### 4.2.1 Расчет флуктуационно-диссипативного отношения. Метод пробного поля.

Функция отклика спиновой системы на внешнее магнитное поле $h$, приложенное в момент времени $t_w$ определяется соотношением (4.2)

$$R\left(t,t_w\right) = \frac{1}{V}\int d^d x \frac{\delta < S(x,t) >}{\delta h(x,t)} |_{h=0} . \tag{4.8}$$

Для определения флуктуационно-диссипативного отношения существуют два способа. Первый из них заключается в "включении"малого внешнего поля в системе в момент $t_w$. Известно, что присутствие поля разрушает фазовый переход второго рода. Поэтому в процессе моделирования в этот момент на решетке для каждого узла $i$, содержащего спин, задавалось малое бимодальное поле $h_i = \pm h$. Оно должно удовлетворять двум соотношениям: среднее по всем узлам решетки равно $0 < h_i >= 0$, а также отклик системы на внешнее возмущение должен быть линеен, то есть сама величина $h \ll 1$. В данной работе использовалось значение $h = 0.02$. При исследовании рассматриваемым способом функция отклика не может быть непосредственно вычислена. В численном моделировании более подходящей величиной для расчета является интегрированная функция отклика (называемая также динамической восприимчивостью) [112, 113]

$$\chi(t,t_w) = T\int_{t_w}^{t} dt^{'} R(t,t^{'}). \tag{4.9}$$

Используя соотношение (4.4), можно получить зависимость динамической восприимчивости $\chi(t,t_w)$ от автокорреляционной функции $C(t,t_w)$

$$\begin{aligned} T\chi(t,t_w) = \int_{t_w}^{t} X(t,t_w)\frac{\partial C(t,t_w)}{\partial t_w}dt^{'} = \\ = \int_{C(t,t_w)}^{1} X(C)dC. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Флуктуационно-диссипативное отношение $X^{\infty}$ может быть получена следующим образом. Проведя расчет автокорреляционную функции и и динамической восприимчивости, выражаем зависимость $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$ в виде некоторой кривой. Тогда, в соответствии с (4.10), ее кривизна будет определять асимптотическое отношение $X^{\infty}(t_w) = \lim_{t\to\infty} X(t,t_w)$:

$$X^{\infty}(t_w) = -\lim_{C\to 0}\frac{\partial(T\chi(t,t_w))}{\partial C(t,t_w)}. \tag{4.11}$$

Получая значения $X^{\infty}(t_w)$ для различных времен ожидания и проводя экстраполяцию $t_w \to \infty$, определяется искомые значения флуктуационно-диссипативного отношения $X^{\infty}$ (4.5).

### 4.2.2 Расчет флуктуационно-диссипативного отношения. Использование динамики тепловой бани.

Другим способом получения ФДО является расчет непосредственно функции отклика, посредством использования динамики тепловой бани [55]. Был использован метод, предложенный и развитый в работах [113–115]. Вероятность перехода спина системы в новое состояние $S_i \to S_i^{'}$ определяется формулой:

$$W_{sp}(S_i \to S_i^{'}) = \frac{exp(-\frac{1}{T}H(S_i^{'}))}{\sum_{S_j} exp(-\frac{1}{T}H(S_j))}, \tag{4.12}$$

где сумма по $S_j$ в знаменателе идет по всем возможным состояниям спина $S_i$ до переворота. Поскольку в модели Изинга два возможных состояния $S_j = \pm 1$, указанную вероятность можно записать в виде:

$$W_{sp}(S_i \to S_i^{'}) = \frac{exp(-\frac{1}{T}H(\sigma_i^{'}))}{exp(\frac{1}{T}H(\sigma_i)) + exp(-\frac{1}{T}H(\sigma_i))}. \tag{4.13}$$

Рассмотрим трехмерную модель Изинга с числом спинов равным $N = pL^3$. Как известно, динамическая эволюция модели в критической точке является марковским процессом. Обозначим за $\varphi(\{S\}, t)$ - вероятность нахождения системы в состоянии с конфигурацией спинов $\{S\}$ в момент времени $t$. Основное кинетическое уравнение для случая дискретного времени может быть представлено в виде

$$\varphi(\{S\}, t + \Delta t) = (1 - \Delta t)\varphi(\{S\}, t) + \Delta t \sum_{\{S'\}} W(\{S'\} \to \{S\}, t)\varphi(\{S'\}, t). \tag{4.14}$$

$W(\{S'\} \to \{S\}, t)$ - вероятность перехода из состояния $\{S'\}$ в состояние $\{S\}$ в момент времени $t$, удовлетворяющее условию нормировки: $\sum_{\{S'\}} W(\{S'\} \to \{S\}, t) = 1$. Можно показать, что аналогичному кинетическому уравнению удовлетворяет и условная вероятность перехода $\varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w)$ - вероятность обнаружения системы в момент времени $t$ в состоянии $\{S\}$, при условии, что в момент времени $t_w < t$ система находилась в состоянии $\{S'\}$

$$\begin{aligned} \varphi(\{S\}, t + \Delta t|\{S'\}, t_w) = (1 - \Delta t)\varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w) + \\ \Delta t \sum_{\{S''\}} W(\{S''\} \to \{S\}, t)\varphi(\{S''\}, t, \{S'\}, t_w). \end{aligned} \tag{4.15}$$

Данная условная вероятность определяется с помощью теоремы Байеса: $\varphi(\{S\}, t) = \sum_{\{S'\}} \varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w)\varphi(\{S'\}, t_w)$.

В динамике тепловой бани вероятность перехода определяется следующим выражением (учитывая формулу (4.13))

$$W(S_i \to S_i^{'}, t) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} W_k(\{S\} \to \{S^{'}\}) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\Big[\prod_{l \neq k} \delta_{S_l S_l^{'}}\Big] W_{sp}(S_k \to S_k'). \tag{4.16}$$

В (4.16) каждая вероятность $W_k$ описывает только односпиновый переворот $S_k \to S'_k$. Для нахождения функции отклика рассмотрим приложение магнитного поля $h_i$ к $i$-му узлу решетки. Зависимость от магнитного поля определяется в выражении (4.16) через гамильтониан (4.6). Используя кинетическое уравнение (4.14) и теорему Байеса, среднее значение спина $< S_j >$ в момент времени $t > t_w$ может быть записано в виде

$$< S_j >= \sum_{\{S\}} S_j \varphi(\{S\}, t) = \sum_{\{S\},\{S'\}} S_j \varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w + \Delta t)\varphi(\{S'\}, t_w + \Delta t)$$
$$= \sum_{\{S\},\{S'\}} S_j \varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w + \Delta t)\Big[(1 - \Delta t)\varphi(\{S'\}, t_w) +$$
$$\Delta t \sum_{\{S''\}} W_k(\{S''\} \to \{S^{'}\})\Big] \quad (4.17)$$

Нас будет интересовать производная $\frac{\partial < S_j(t) >}{\partial h_i}$ в пределе $h_i \to 0$. Поскольку в (4.17) только $W_i$ зависит от поля $h_i$, после дифференцирования получаем выражение

$$\Big[\frac{\partial < S_j(t) >}{\partial h_i}\Big]_{h_i \to 0} = \Delta t \delta_{k,i} \sum_{\{S\},\{S'\},\{S''\}} S_j \varphi(\{S\}, t|\{S'\}, t_w + \Delta t$$
$$\times \Big[\frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{S''\} \to \{S^{'}\})\Big]_{h_i \to 0}. \quad (4.18)$$

Данная производная определяет обобщенную восприимчивость системы для случая приложения малого магнитного поля в промежутке $[t_w, t_w + \Delta t]$: $\chi_{ji}(t, [t_w, t_w + \Delta t]) = T \frac{\partial < \sigma_j(t) >}{\partial h_i}$. Дифференцируя вероятность перехода (4.16), получаем

$$\Big[\frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{S''\} \to \{S^{'}\})\Big]_{h_i \to 0} = \beta W_i(\{S''\} \to \{S^{'}\})\Big[S'_i - S_i^W\Big] \quad (4.19)$$

, где $S_i^W = tanh(\beta J \sum_{m \neq i} S'_m)$. Подставляя (4.19) в (4.18), а также используя кинетическое уравнение (4.14), получаем обобщенную восприимчивость в виде

$$\chi_{ji}(t,[t_w,t_w+\Delta t]) = \delta_{k,i} \sum_{\{S\},\{S'\}} S_j \varphi(\{S\},t|\{S'\},t_w+\Delta t)\Big[S_i' - S_i^W\Big]$$
$$\times\Big[\varphi(\{S'\},t_w+\Delta t) - (1-\Delta t)\varphi(\{S'\},t_w)\Big]. \quad (4.20)$$

Функция отклика $R_{ji}$ связана с обобщенной восприимчивостью через выражение

$$\chi_{ji}(t,[t_w,t_w+\Delta t]) = T\int_{t_w}^{t_w+\Delta t} R_{ji}(t,s)ds = TR_{ji}(t,t_w)\Delta t + O(\Delta t^2). \quad (4.21)$$

Моделирование критической эволюции системы методом Монте-Карло является реализацией марковского процесса. Время в численном моделировании является дискретной величиной. Полагая $\Delta t = 1$ в (4.20), получаем

$$\chi_{ji}(t,[t_w,t_w+\Delta t]) = \delta_{k,i} < S_j(t)\Big[S_i(t_w+1) - S_i^W(t_w+1)\Big] > . \quad (4.22)$$

В качестве единицы времени в моделировании используется шаг Монте-Карло на спин (MCS/s). Данная величина определяется как $N = pL^3$ переворотов спинов. Учитывая (4.22), итоговое выражение для определения функции отклика в процессе численного исследования записывается в виде

$$R(t,t_w) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} R_{ii} = \frac{1}{N}\beta\sum_{i=1}^{N} < S_i(t)\Big[S_i(t_w+1) - S_i^W(t_w+1)\Big] > . \quad (4.23)$$

Функция $R(t,t_w)$ усредняется по всем переворотам спинов в течении одного шага Монте-Карло. Учитывая формулу 4.7, производная автокорреляционной функции по времени ожидания вычисляется по формуле

$$\frac{\partial}{\partial t_w} C(t,t_w) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} < S_i(t)\Big[S_i(t_w+1) - S_i(t_w)\Big] > . \quad (4.24)$$

С помощью формул (4.23 - 4.24) определяется флуктуационно-диссипативное отношение

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\frac{\partial}{\partial t_w} C(t, t_w)} = \frac{\sum_{i=1}^{N} < S_i(t) \Big[ S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1) \Big] >}{\sum_{i=1}^{N} < S_i(t) \Big[ S_i(t_w + 1) - S_i(t_w) \Big] >} \quad (4.25)$$

, где $S_i^W = tanh(\beta J \sum_{m \neq i} S'_m)$ (сумма по $m$ проходит только по ближайшим соседям спина в $i$-ом узле).

## 4.3 Детали моделирования

В данной главе проведено исследования эффектов старения и нарушения ФДТ для трехмерной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 1.0, 0.8$ и $0.6$ и линейным размером $L = 128$. Было выбрано высокотемпературное начальное состояние с малой намагниченностью $m_0(p = 1.0) = 0.02, m_0(p = 0.8) = 0.01$ и $m_0(p = 0.6) = 0.05$. Моделирование проводилось на временах $t - t_w$ до $10000$ $\mathrm{MCS/s}$ при критических температурах $T_c(p = 1) = 4.5114(1)$, $T_c(p = 0.8) = 3.4995(2)$ и $T_c(p = 0.6) = 2.4241(1)$, соответствующих рассматриваемым спиновым концентрациям [96]. После получения начальной конфигурации, система помещалась в критическую точку и свободно эволюционировала до времени $t_w$, после чего осуществлялся расчет требуемых величин. Статистическое усреднение проводилось по $90000$ прогонок в случае бездефектной системы $p = 1$ и по $6000$ примесных конфигураций в случае неупорядоченных систем, каждая из которых дополнительно усреднялась по $15$ прогонкам.

Для расчета автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ 4.7 и флуктуационно-диссипативного отношения через пробное внешнее поле $4.8$ был использован алгоритм Метрополиса. Расчет функции отклика $R(t, t_w)$ 4.23 и флуктуационно-диссипативного отношения (4.25) осуществлялся с помощью моделирования динамики тепловой бани.

# 4.4 Результаты исследования эффектов старения в трехмерной модели Изинга

## 4.4.1 Эффекты старения в структурно неупорядоченной модели Изинга.

На рисунке  4.1 в двойном логарифмическом масштабе представлены полученные временные зависимости автокорреляционной функции для систем со спиновыми концентрациями $p = 1,\ 0.8$ и $0.6$. Анализируя поведение кривых, можно сделать вывод о существовании нескольких режимов в поведении двухвременной автокорреляционной функции. На временном интервале $t - t_w \ll t_w$ в ее поведении отсутствует зависимость от времени ожидания и $C(t, t_w) = C(t - t_w)$, означающий квазиравновесный режим, характеризуемый степенной зависимостью $C(t - t_w) \sim (t - t_w)^{-2\beta/\nu z}$.

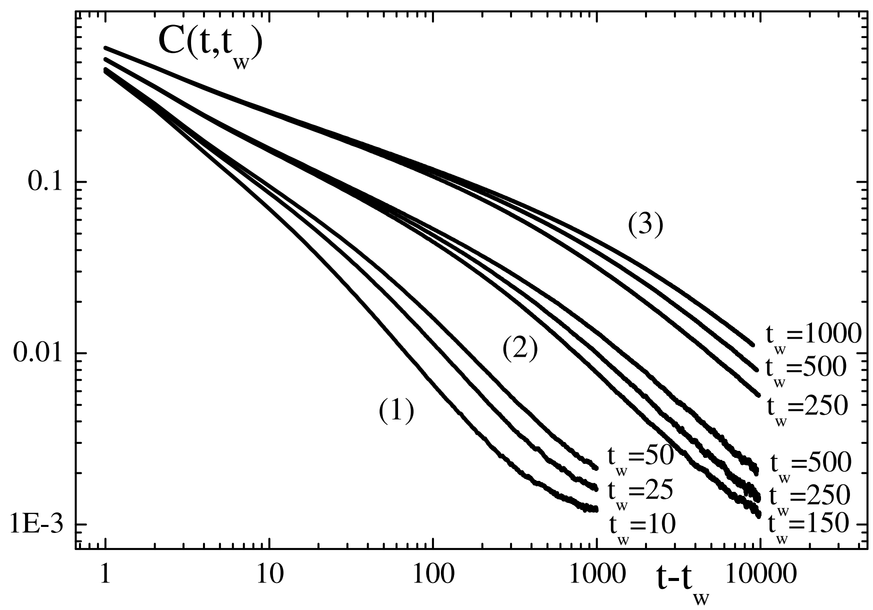


Рисунок 4.1: Зависимость $C(t, t_w)$ для различных времен ожидания. (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$.

На достаточно больших временах наблюдения $t - t_w$ и ожидания $t_w$, но сравнимых друг с другом $t - t_w \sim t_w \gg 1$, во временной эволюции автокорреляционной функции проявляется существенная зависимость от времени $t_w$, характеризующая эффекты старения (рис. 4.1). Как следует из графика, происходит замедление спадания временной корреляции с увеличением «возраста» системы $t_w$. Для численного доказательства наличия старения, на данном временном этапе была проведена аппроксимация автокорреляционной функции зависимостью $C(t, t_w) \sim (t - t_w)^{-\lambda}$. Так показатель $\lambda$ характеризует «скорость» спадания автокорреляционной функции: чем он выше, тем быстрее система эволюционирует к квазиравновесному состоянию.

Значения показателя $\lambda$ должны соответствовать неравновесному режиму критической динамики системы, на котором проявляется влияние высокотемпературного начального состояния. Для выделения таких интервалов были проанализированы временные зависимости намагниченности

$$m(t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} p_i S_i(t) \right\rangle. \tag{4.26}$$

На рис. 4.2 приведены полученные кривые для спиновых концентраций $p = 1,\ 0.8$ и $0.6$. Как показано в главах 3.1, 2.1, на временном этапе неравновесной эволюции, соответствующих влиянию дефектов структуры, наблюдается характерный рост намагниченности по степенному закону $m(t) \sim m_0 t^{\theta'}$. Затем рост намагниченности, после кросоверной области, переходит в спадание по закону $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. На этом этапе в двухвременных характеристиках $C(t, t_w) = C(t - t_w)$ и $R(t, t_w) = R(t - t_w)$ не проявляется явная зависимость от времени ожидания $t_w$. В исследовании эффектов старения интересующим временным интервалом как раз является этап проявления влияния дефектов структуры. Как можно видеть из рис. 4.2, для бездефектной системы кросоверный этап в поведении намагниченности начинается с времен порядка $\sim 1200 MCS/s$. Также это проявляется в эволюции автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ (рис. 4.1), где кривые для различных времен ожидания при $t \sim 1000 MCS/s$ испытывают переход в квазиравновесный режим. Таким образом, для чистой системы характерный интервал проявления эффектов старения составляет до $1000 MCS/s$. Как следует из поведения намагниченности, для структурно неупорядоченных систем длительность интервала на порядок превосходит случай бездефектной системы и ограничивается $\sim 10000 MCS/s$. Данные особенности позволяют при анализе эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы проводить исследования при значительно больших

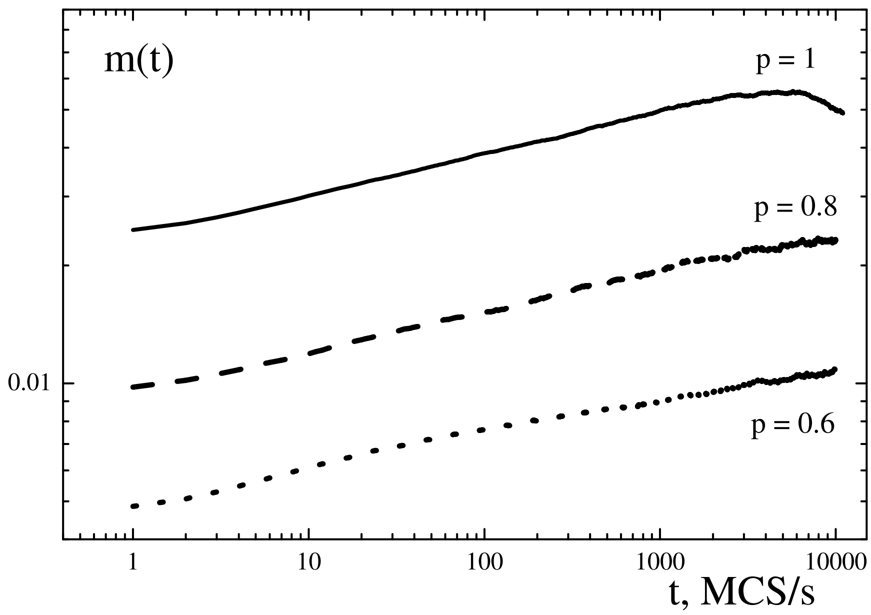


Рисунок 4.2: Временная зависимость намагниченности $m(t)$ для различных примесных концентраций.

временах ожидания $t_w$, чем в случае чистых систем. Это повышает достоверность получаемых характеристик для критического состояния системы с аномально большими по амплитудам и долгоживущими флуктуациями параметра порядка. При анализе указанных интервалов были полученные значения показателя $\lambda$, приведенные в таблице 4.1. Полученные значения по-

Таблица 4.1: Значения показателя $\lambda, C(t,t_w) \sim (t-t_w)^{\lambda}$ на этапе $t-t_w \sim t_w \gg 1$.

| $t_w$ | $\lambda$ | $t_w$ | $\lambda$ | |
|---|---|---|---|---|
| | $p=1$ | | $p=0.8$ | $p=0.6$ |
| 10 | 1.048(18) | 50 | 0.894(14) | 0.745(32) |
| 25 | 1.023(14) | 250 | 0.739(40) | 0.604(45) |
| 50 | 0.934(11) | 500 | 0.644(25) | 0.531(40) |
| 75 | 0.879(12) | 1000 | 0.569(30) | 0.467(36) |

казателей $\lambda$ из табл. 4.1 указывают на замедление динамической эволюции системы с ростом $t_w$, а именно, с увеличением времени ожидания $t_w$ показатель $\lambda$ уменьшается, то есть релаксация замедляется. При этом увеличение концентрации дефектов приводит к усилению эффектов старения.

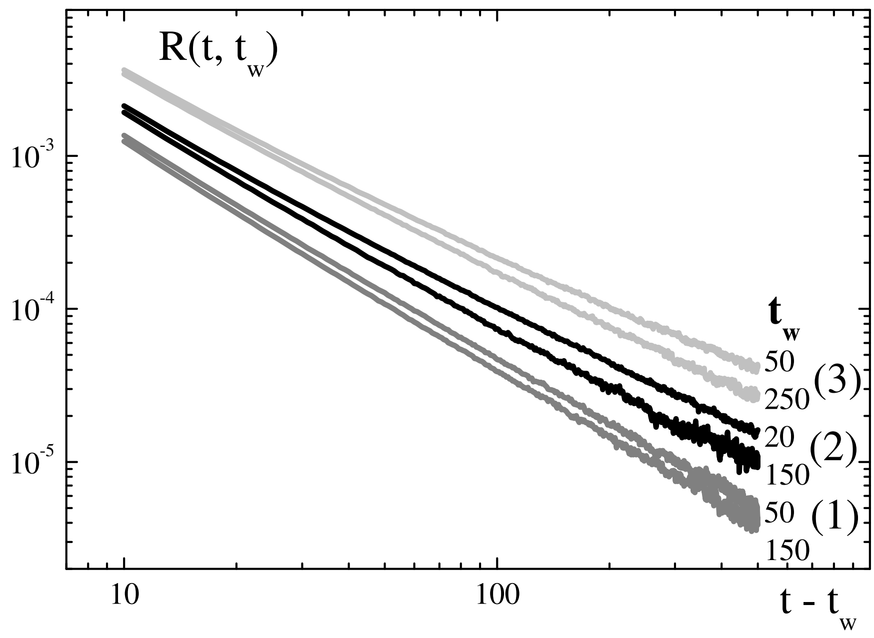


Рисунок 4.3: Зависимость $R(t, t_w)$ для различных времен ожидания. (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$.

Используя метод тепловой бани (раздел 4.2.2), была рассчитана функция отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ (4.23). На рис. 4.3 демонстрируются временные зависимости $R(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ для различных времен ожидания. Как следует из полученных результатов, с ростом $t_w$, функция отклика уменьшается. Это означает, что с увеличением времени ожидания, реакция системы на внешнее возмущение уменьшается, что и является проявлением эффектов старения.

На временном этапе $t - t_w \sim t_w \gg 1$ ренормгрупповой анализ для автокорреляционной функции и функции отклика предсказывает следующую скейлинговую зависимость

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/\nu z} F_C(t/t_w),$$
$$R(t, t_w) \sim t_w^{-1-2\beta/\nu z} F_R(t/t_w).$$

Для ее проверки было осуществлено построение зависимостей $t_w^{2\beta/\nu z} C(t, t_w)$ и $t_w^{1+2\beta/\nu z} R(t, t_w)$ от $(t - t_w)/t_w$. Результат для автокорреляционной функции приведен на рис. 4.4, для функции отклика - на рис. 4.5. Итоговые кривые демонстрируют "коллапс"полученных данных для различных

$t_w$ на соответствующих $p = 1.0, 0.8$ и $0.6$ универсальных кривых, соответствующих скейлинговым функциям $F_C(t/t_w)$ и $F_R(t/t_w)$. При построении зависимостей были использованы следующие показатели: для системы с $p = 1 - \beta/\nu = 0.517(2)$, $z = 2.042(6)$ [100], для $p = 0.8 - \beta/\nu = 0.504(14))$, $z = 2.191(21)$ (вторая глава данной диссертации, 2.6), для $p = 0.6 - \beta/\nu = 0.460(31))$, $z = 2.657(34)$ (третья глава данной диссертации, 3.5).

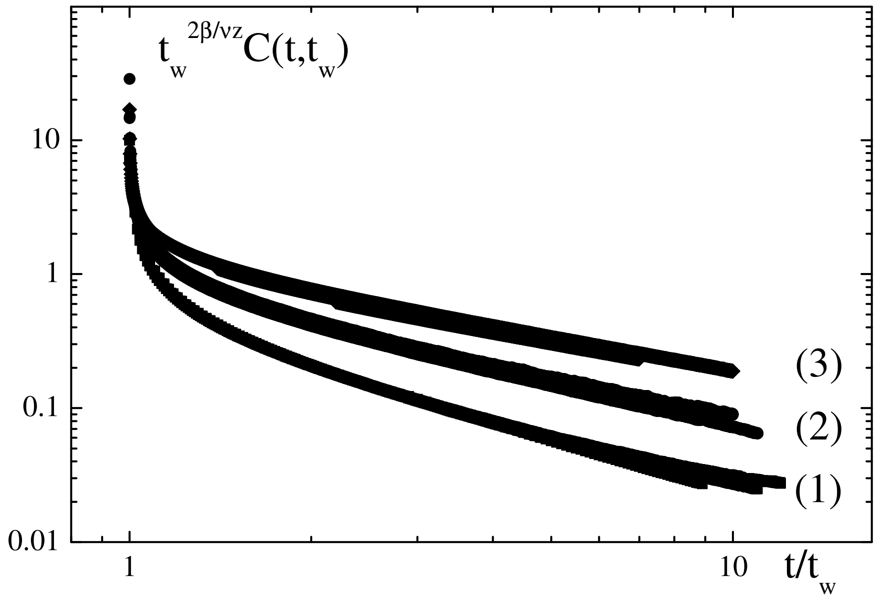


Рисунок 4.4: Скейлинговые зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$. (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$

На временах $(t - t_w) \gg t_w$ скейлинговые функции $F_{C|R}$ из (4.27) характеризуются зависимостью

$$F_C \sim A_C(t/t_w)^{-c_a},$$
$$F_R \sim A_R(t/t_w)^{-c_r}.$$

На этом этапе эволюции отсутствует влияние эффектов старения и показатели автокорреляционной функции $c_a$ и функции отклика $c_r$ связаны с динамическими критическими индексами $z$ и $\theta'$ соотношением

$$c_a = c_r = \frac{d}{z} - \theta'. \tag{4.27}$$

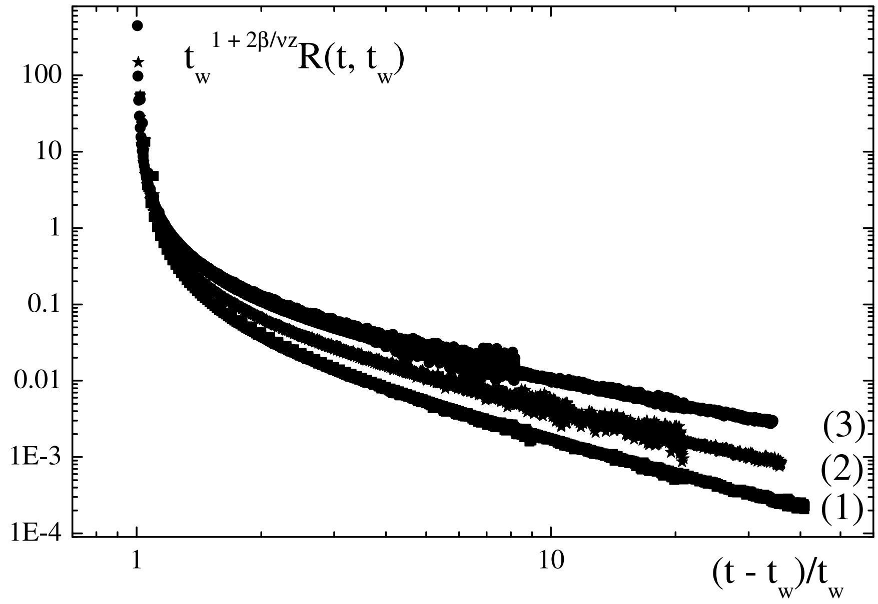


Рисунок 4.5: Скейлинговые зависимости функции отклика $R(t, t_w)$. (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$

Полученные значения приведены в табл. 4.2. Стоит отметить, что значе-

Таблица 4.2: Значения показателей скейлинговых функций $F_C$, $(c_a)$ , $F_R$, $(c_r)$.

| | $p = 1.0$ | $p = 0.8$ | $p = 0.6$ |
|---|---|---|---|
| $c_a$ | $1.333(40)$ | $1.237(22)$ | $0.982(30)$ |
| $c_r$ | $1.357(16)$ | $1.251(22)$ | $0.950(8)$ |

ние показателя $c_a$ могут быть получены в численном исследовании системы методом коротковременной динамики при анализе критического поведения автокорреляционной функции в системе, характеризуемой высокотемпературным начальным состоянием. Так, в работе [100] для "чистой"трехмерной модели Изинга было получено значение $c_a = 1.362(19)$, которое демонстрирует хорошее соответствие с полученными значениями в данной главе.

Исследования коротковременной динамики слабо и сильно неупорядоченной модели Изинга в рамках глав 2 и 3 приводят к значениям $c_a = 1.242$ для слабо неупорядоченной системы и $c_a = 0.936$ для сильно неупорядоченной системы. Оба значения хорошо согласуются в пределах погрешностей с показателями, вычисленными при анализе эффектов старения в данных системах 4.2.

### 4.4.2 Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы.

Для расчета флуктуационно-диссипативного отношения 4.5 были применены два способа компьютерного моделирования: метод пробного поля, описанный в разделе 4.2.1, и моделирование с помощью динамики тепловой бани из раздела 4.2.2.

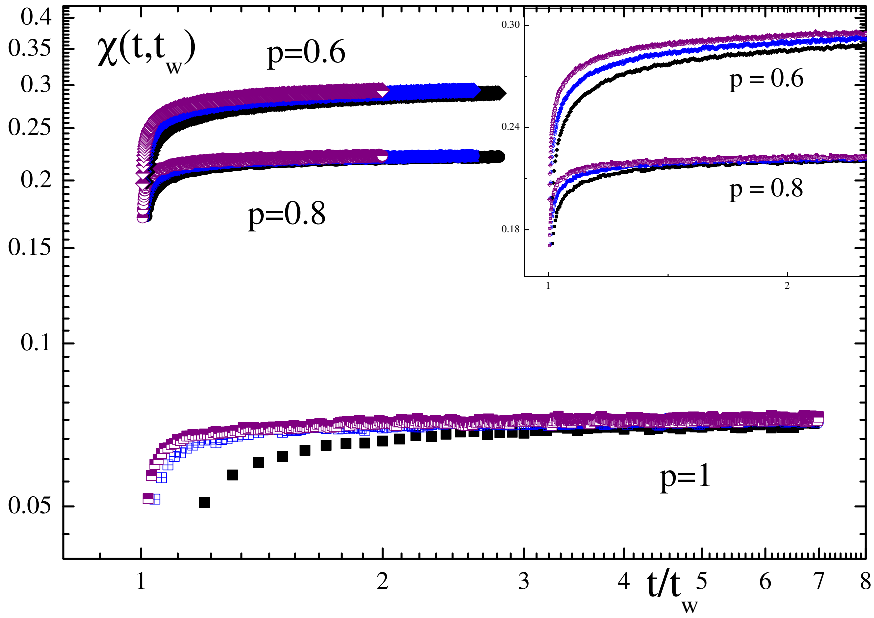


Рисунок 4.6: Зависимость обобщенной восприимчивости $\chi(t,t_w)$. Времена ожидания (для различных кривых, снизу вверх): $p=1$ – 10, 50, 100 $MCS/s$; $p=0.8$ и $p=0.6$ – 250, 500, 1000 $MCS/s$.

При использовании внешнего магнитного поля, системы эволюционировала после времени ожидания $t_w$ в соответствии с гамильтонианом (4.6) и рассчитывалась динамическая восприимчивость $\chi(t,t_w)$ (4.11) по формуле

$$\chi(t,t_w) = \frac{1}{pL^3h^2}\sum_i \overline{< h_i(t_w)S_i(t) >}. \tag{4.28}$$

На рис. 4.6 показана временная зависимость $\chi(t,t_w)$ в шкале $t/t_w$. Полученные результаты наглядно демонстрируют проявление эффектов старения в поведении динамической восприимчивости.

Скейлинговое поведение в режиме $t-t_w \gg t_w \gg 1$ динамических функций $C(t,t_w)$ и $R(t,t_w)$, определяемое соотношениями (4.27, 4.27), приводит к функциональной зависимости флуктуационно-диссипативного отношения $X(t, t_w)$ только от $t/t_w$ [**REF, Chatelain**].

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t/t_w)}{(\partial/\partial t_w)C(t/t_w)} \sim \\ \sim \frac{F_R(t/t_w)}{(2\beta/\nu z)F_C(t/t_w) + (t/t_w)F_C'(t/t_w)}.$$

Подобное поведение $X(t, t_w)$ было подтверждено ренормгрупповыми расчетами в работе [45]. Исходя из скейлинговых соотношений (4.27), предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения принимает вид

$$X^{\infty} = \lim_{t_w \to \infty} \lim_{t \to \infty} X(t, t_w) = \frac{A_R}{A_C}\left[c_a - \frac{2\beta}{\nu z}\right]^{-1}. \tag{4.29}$$

Из данного выражения видно, что ФДО $X^{\infty}$ является новой универсальной характеристикой критического поведения системы.

На рис. 4.7 демонстрируются полученные зависимости $T\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$. Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы демонстриру-

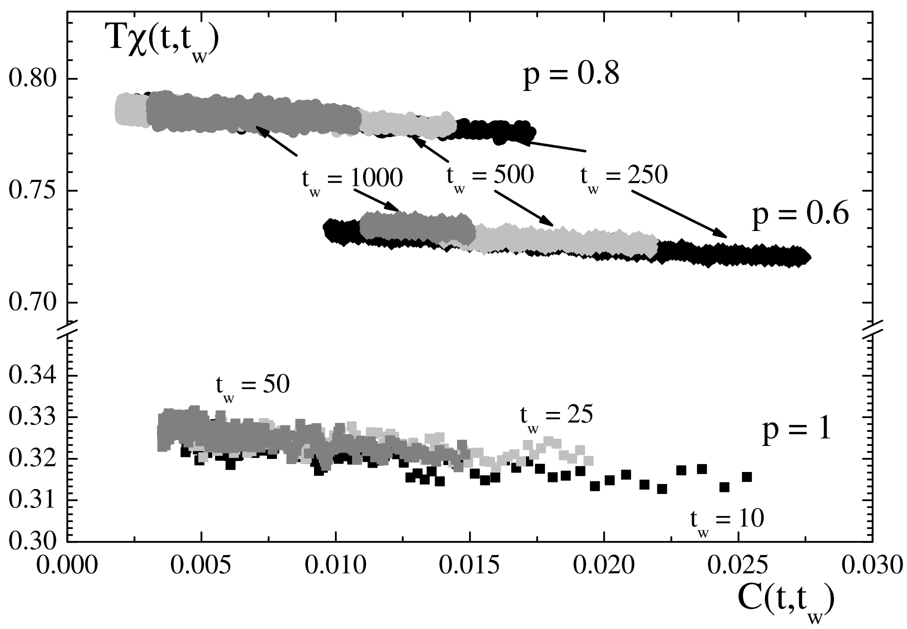


Рисунок 4.7: Зависимость $T\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$ для различных спиновых концентраций.

ется на рис. 4.8. Приводятся зависимости $\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$ для времен ожидания $t_w = 1000 MCS/s$ в случае структурно неупорядоченных систем с $p = 0.8$ и $0.6$, и для времени ожидания $t_w = 50$ для бездефектной системы. Пунктирной линией показана кривая, на которой выполняется флуктуационно-диссипативная теорема, то есть $X(t, t_w) = 1$. Наглядно видно, что как однородная, так и структурно неупорядоченные системы демонстрируют нарушение ФДТ в своей критической эволюции.

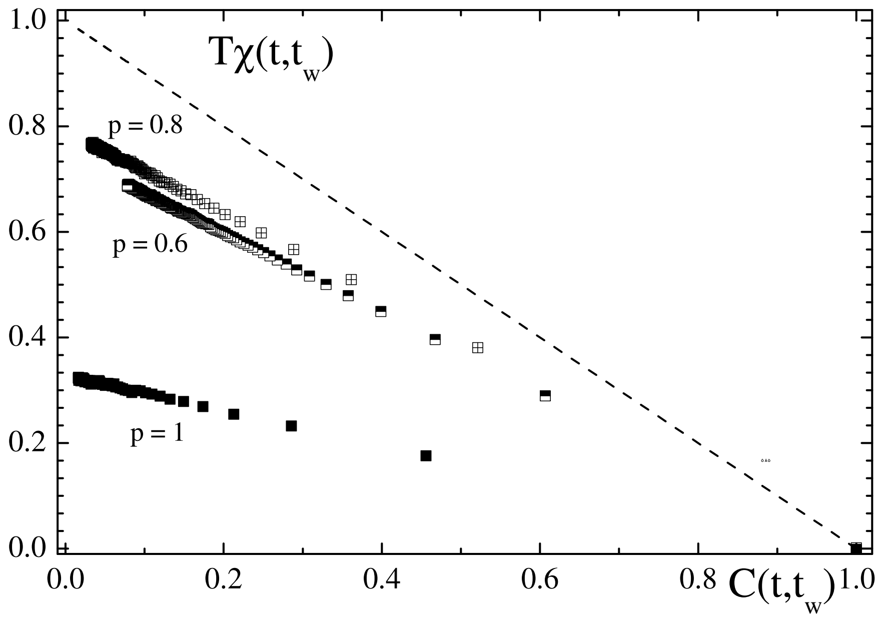


Рисунок 4.8: Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в поведениях зависимости $T\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$.

В соответствие с соотношением (4.11), по наклону полученных кривых (рис. 4.7) были определены значения $X^{\infty}(t_w)$ для каждого времени ожидания. На рисунке 4.9 демонстрирует процедера получения предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^{\infty} = \lim_{t_w \to \infty} X^{\infty}(t_w) = \lim_{1/t_w \to 0} X^{\infty}(t_w)$. Итоговые значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^{\infty}$ приведены в табл. 4.3 Исходя из независимости предельного флуктуационно-диссипативного отношения как новой характеристики критического поведения систем, по полученным значениям ФДО $X^{\infty}$ можно сделать вывод о независимых классах универсальности для бездефектных $X^{\infty}(p = 1) = 0.391(12)$, слабо неупорядоченных $X^{\infty}(p = 0.8) = 0.418(11)$ и сильно неупорядоченных систем $X^{\infty}(p = 0.6) = 0.443(10)$.

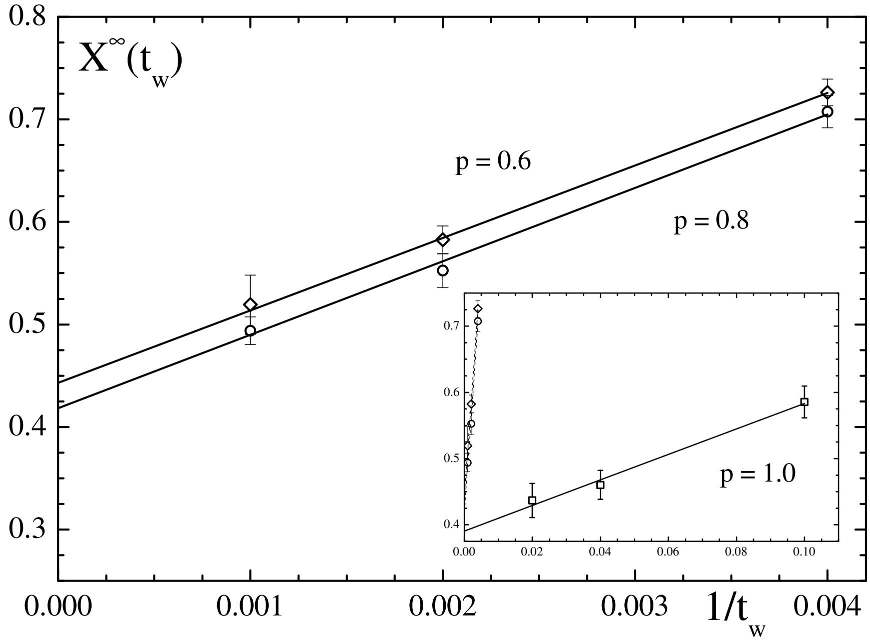


Рисунок 4.9: Нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в поведениях зависимости $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$.

Для проверки полученных значений предельного ФДО был осуществлен расчет $X^\infty$ в рамках динамики тепловой бани 4.2.2. С помощью этого метода, осуществляется непосредственный расчет флуктуационно-диссипативного отношения $X(t,t_w)$ (4.25), при условии, что моделирование динамики системы происходит в отсутствие внешних полей. Таким образом, гамильтониан модели Изинга (4.6) ограничивается спиновой составляющей

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j S_i S_j. \tag{4.30}$$

Таблица 4.3: Значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty$ для систем со спиновой концентрацией $p = 1,\ 0.8$ и $0.6$, полученные при моделировании в присутствии внешнего магнитного поля.

| $t_w$ | $X^\infty$ | $t_w$ | $X^\infty$ | |
|---|---|---|---|---|
| | $p = 1.0$ | | $p = 0.8$ | $p = 0.6$ |
| 10 | 0.586(24) | 250 | 0.708(16) | 0.726(13) |
| 25 | 0.460(22) | 500 | 0.553(17) | 0.583(14) |
| 50 | 0.437(26) | 1000 | 0.494(14) | 0.519(29) |
| $\to\infty$ | 0.391(12) | $\to\infty$ | 0.418(11) | 0.443(10) |

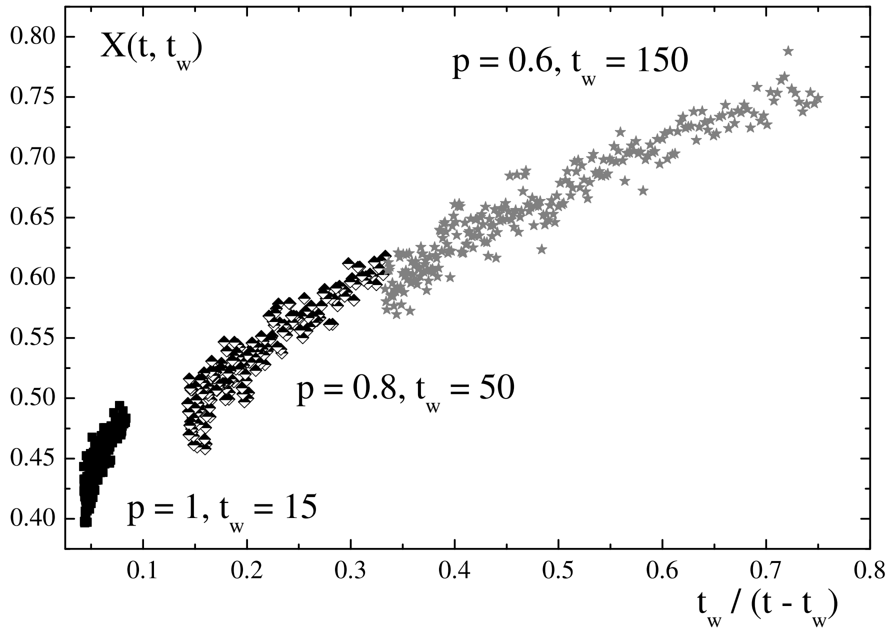


Рисунок 4.10: Функциональные зависимости $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$ при $t - t_w \gg t_w$ для различных спиновых концентраций.

На рис. 4.10 представлено вычисленное на основе формулы (4.25) флуктуационно-диссипативное отношение в виде функциональной зависимости $X(t, t_w)$ от $t_w/(t-t_w)$ при $t-t_w \gg t_w$ для систем с различными спиновыми концентрациями. Линейная аппроксимация зависимости $X(t, t_w)$ при $t_w/(t - t_w) \to 0$ дает возможность определить значения $X^\infty(t_w)$ для каждого $t_w$ и соответствующей спиновой концентрации. Используя линейную аппроксимацию, были определены значения $X^\infty(t_w) = \lim_{t\to\infty} X(t, t_w)$. К полученным значениям для различных времен ожидания была применена аппроксимация $X^\infty(t_w \to \infty)$, которая позволила определить искомое предельное флуктуационно-диссипативное отношение $X^\infty = \lim_{t_w\to\infty} X^\infty(t_w)$. На рис. 4.11 демонстрируется зависимость $X^\infty(t_w)$ от $1/t_w$.

Полученные значения $X^\infty$ для различных спиновых концентраций приведены в табл. 4.4. Как и при использовании внешнего магнитного поля, полученные асимптотические значения флуктуационно-диссипативного отношения демонстрируют независимость в пределах погрешности вычислений для случаев трехмерной однородной, слабо и сильно неупорядоченной модели Изинга.

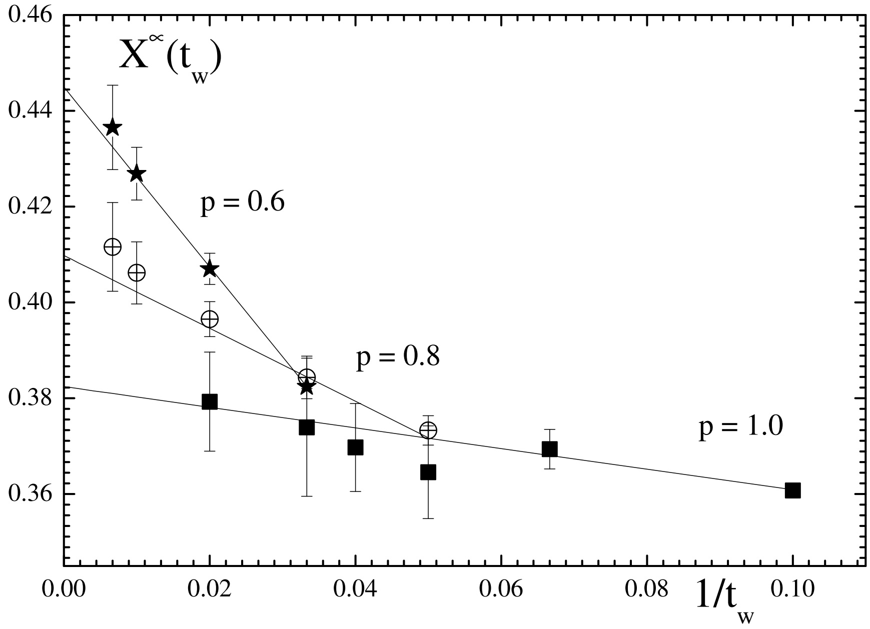


Рисунок 4.11: Функциональные зависимости $X^{\infty}(t_w)$ от $1/t_w$. Значения $X^{\infty}(p)$ получаются путем линейной аппроксимации.

## 4.5 Анализ результатов и выводы.

Осуществлено численной исследование эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга при моделировании из высокотемпературного начального состояния $m_0 \ll 1$ для случаев однородной ($p = 1$), слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем. Получены значения двухвременной автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика на внешнее возмущение $R(t, t_w)$. Показано, что эффекты старения проявляются на этапе $(t - t_w) \sim t_w \gg 1$. На основе анализа поведения автокорреляционной функции в критической точке, для данного временного этапа выявлено замедление релаксации системы с ростом времени ожидания $t_w$ (табл. 4.1). Также полученные результаты показывают, что наличие структурного беспорядка приводит к усилению эффектов старения.

Проведен анализ предсказываемых теорией скейлинговых зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика. На рисунках 4.4 и 4.5 продемонстрирован коллапс полученных данных на универсальные кривые в соответствии со скейлинговыми соотношениями (4.27). Соответ-

Таблица 4.4: Значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty$ для систем со спиновой концентрацией $p = 1,\ 0.8$ и $0.6$ полученные при моделировании динамики тепловой бани.

| $t_w$ | $X^\infty$ | $X^\infty$ | |
|---|---|---|---|
| | $p = 1.0$ | $p = 0.8$ | $p = 0.6$ |
| 10 | 0.361(2) | | |
| 15 | 0.369(4) | | |
| 20 | 0.365(9) | 0.373(3) | |
| 25 | 0.370(9) | | |
| 30 | 0.373(14) | 0.384(4) | 0.382(1) |
| 50 | 0.379(10) | 0.397(4) | 0.407(3) |
| 100 | | 0.406(7) | 0.427(6) |
| 150 | | 0.412(9) | 0.437(9) |
| $\to\infty$ | 0.381(13) | 0.413(11) | 0.446(10) |

ствующие скейлинговые функции $F_C(t/t_w)$ и $F_R(t/t_w)$ в долговременном режиме $t/t_w \gg 1$ характеризуются зависимостью $F_{C|R} \sim (t/t_w)^{-c_{a|r}}$. В процессе анализа автокорреляционной функции были получены значения $c_a(p = 1) = 1.333(40)$, $c_a(p = 0.8) = 1.237(22)$ и $c_a(p = 0.6) = 0.982(30)$. Исследование функции отклика привело к значениям $c_r(p = 1) = 1.357(16)$, $c_r(p = 0.8) = 1.251(22)$ и $c_r(p = 0.6) = 0.950(8)$. Таким образом, в пределах погрешностей исследования показатели $c_a$ и $c_r$ совпадают. Данные индексы связаны с динамическими критическими показателями $\theta'$ и $z$ $c_{a|r} = d/z - \theta'$ и могут быть вычислены в рамках метода коротковременной динамики. В работе [100] был получен показатель $c_a = 1.362(19)$. В главах 2, 3 данной диссертации были получены значения $c_a = 1.242$ для слабо неупорядоченной системы и $c_a = 0.936$ для сильно неупорядоченной системы. Как видно, результаты расчета показателя $c_a$, полученные при исследовании эффектов старения, находятся в хорошем согласии с результатами МКД.

Впервые в численном исследовании трехмерной модели Изинга установлено нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы на неравновесном критическом участке динамической эволюции и получены значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения. Были реализованы два способа получения ФДО: моделирование поведения системы в малом внешнем магнитном поле с помощью динамики Метрополиса и непосредственные расчет отношения с помощью динамики тепловой бани. В первом случае были получены значения $X^{\infty}(p = 1) = 0.391(12)$, $X^{\infty}(p = 0.8) = 0.418(11)$ и $X^{\infty}(p = 0.6) = 0.443(10)$, второй способ привел к значениям $X^{\infty}(p = 1) = 0.381(13)$, $X^{\infty}(p = 0.8) = 0.413(11)$ и $X^{\infty}(p = 0.6) = 0.446(10)$. Как следует из приведенных результатов, оба способа продемонстрировали хорошее согласие в рамках погрешностей для систем, с различными спиновыми концентрациями. Полученные значения предельного ФДО указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении бездефектной и структурно-неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга. А также на то, что в сильно неупорядоченных системах наличие дефектов приводит к большим значениям $X^{\infty}$, чем в слабо неупорядоченных.

В работе [45] было проведено ренормгрупповое описание неравновесного критического поведения диссипативных систем с не сохраняющимся параметром порядка. Для данных систем был осуществлен расчет флуктуационно-диссипативного отношения с применением метода $\varepsilon = 4-d$-разложения во втором порядке теории. Полученное в виде ряда по $\varepsilon$ ФДО имело вид

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(X^{\infty}_{q=0})^{-1} = 1 + \frac{n+2}{4(n+8}\varepsilon + \varepsilon^2\frac{n+2}{(n+8)^2}\times \\ \times\left[\frac{n+2}{8} + \frac{3(3n+14)}{4(n+8)}\right],\end{aligned} \tag{4.31}$$

где $n$ - число компонент параметра порядка. Для трехмерной модели Изинга с $\varepsilon = 1$ и $n = 1$ было получено значение $X^{\infty} = 0.429(6)$ при применении метода суммирования аппроксимантов Паде. При этом, полученный ряд является не суммируемым в рамках улучшенных техник суммирования Паде-Бореля или Паде-Бореля-Лероя.

В работе [46] в однопетлевом приближении было рассчитано значение ФДО для слабо неупорядоченной модели Изинга

$$\frac{1}{2}(X^{\infty}_{q=0})^{-1} = 1 + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{6\varepsilon}{53}}. \tag{4.32}$$

Подстановка $\varepsilon = 1$ в (4.32) приводит к значению $X^{\infty} = 0.416$. Авторами было отмечено, что данные результаты вычисления предельного флуктуационно-диссипативного отношения в первом порядке теории для неупорядоченной модели Изинга не позволяют выделить особенности влияния дефектов на ФДО, для этого требуется проведение вычислений в более высоких порядках теории. Вместе с тем, вычисленные в данной главе значения $X^{\infty}$ для слабо неупорядоченной системы со спиновой концентрацией $p = 0.8$ находятся в хорошем согласии в пределах погрешности с результатом ренормгруппового описания.

В работе [116] авторы сообщили, что проведенные численные исследования неравновесного критического поведения для бездефектной трехмерной модели Изинга дали предварительные значения $X^{\infty} \approx 0.4$. Учитывая полученные в данной главе значения $X^{\infty}(p = 1) = 0.391(12)$ и $0.380(13)$, можно сделать вывод, что присутствие дефектов структуры приводит к новому классу универсальности критического поведения для трехмерной модели Изинга, к набору определяющих характеристик относятся и значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения с $X^{\infty}_{disord} > X^{\infty}_{pure}$.

Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения для сильно неупорядоченной системы $X^{\infty} = 0.443(10)$ и $X^{\infty} = 0.446(10)$ демонстрируют значительное отличие от значений слабо неупорядоченной системы, превышающее пределы погрешностей исследования. Таким образом, полученные в рамках данной главы результаты для предельного ФДО позволяют сделать вывод о том, что бездефектные, слабо- и сильнонеупорядоченные системы, описываемые трехмерной моделью Изинга, принадлежат к различным классам универсальности критического поведения.

# Заключение

В диссертационной работе проведено численное исследование влияния немагнитного случайно распределенного структурного беспорядка на неравновесное критическое поведение трехмерной ферромагнитной модели Изинга.

С использованием метода Монте-Карло были исследованы системы со спиновой концентрацией $p = 0.95,\ 0.8,\ 0.6$ и $0.5$ в коротковременном режиме неравновесной динамики. Показано, что присутствие структурного беспорядка оказывает существенное влияние на процессы, протекающие в точке фазового перехода второго рода. Выявлено существование двух классов универсальности критического поведения для случаев слабо и сильно неупорядоченных систем. Показано проявление эффектов старения в критическом поведении однородной и неупорядоченной модели Изинга.

Исследование критических явлений является чрезвычайно сложной задачей как в аналитической, так и в вычислительной физике. Для решения исходной задачи исследования потребовалось проведения значительного объема вычислений на ЭВМ. Следует отметить, что разработанный в процессе выполнения диссертационной работы комплекс программ для ЭВМ представляет собой хороший базис для дальнейших исследований неравновесной релаксации различных систем.

Основные оригинальные результаты диссертации сформулированы в следующих положениях:

1. Проведено численное исследование неравновесной критической динамики трехмерной структурно неупорядоченной спиновой модели Изинга методом коротко временной динамики в случаях слабого и сильного разбавления немагнитными случайно распределенными дефектами.

2. Впервые выявлено существование двух универсальных динамических критических режимов со степенным временным изменением измеряемых величин в случае слабого разбавления системы. На раннем временном интервале реализуется неравновесное критическое поведение, соответствующее поведению однородной системы, и лишь затем, проходя через режим кроссоверного поведения, реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы.

3. Осуществлено исследование критической динамики сильно неупорядоченной модели Изинга. Установлено, что в отличие от слабо неупорядоченных систем, на неравновесном этапе эволюции данные системы не демонстрируют двух режимов критического поведения. Получены динамические критические показатели $\theta' = 0.127(16)$ и $z = 2.191(21)$ для слабо неупорядоченной системы и $\theta' = 0.194(41)$ и $z = 2.627(41)$ для сильно неупорядоченной. Сопоставление этих значений позволяет сделать вывод о том, что неравновесное критическое поведение слабо и сильно неупорядоченных систем принадлежит к различным классам универсальности с несовпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований значениями динамических критических индексов $\theta'$ и $z$.

4. Полученные значения статических и динамических критических индексов для слабо неупорядоченных систем находятся в хорошем согласии в пределах статистических погрешностей моделирования и применяемых численных аппроксимаций с результатами ренормгруппового описания, результатами моделирования другими методами, а также согласуются с результатами экспериментальных исследований слабо неупорядоченных изинговских магнетиков.

5. Осуществлено численной исследование эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга при моделировании из высокотемпературного начального состояния $m_0 \ll 1$ для случаев однородной ($p = 1$), слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем. Показано, что эффекты старения проявляются на этапе $(t - t_w) \sim t_w \gg 1$. На основе анализа двухвременного поведения автокорреляционной функции для данного временного

этапа выявлено замедление релаксации системы с ростом времени ожидания $t_w$. Продемонстрировано выполнение предсказываемых теорией скейлинговых зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика с показателями $c_a$ и $c_r$, характеризующимися для этапа с $t - t - w \gg t_w \gg 1$ равными значениями и совпадающими в пределах статистических погрешностей со значением показателя $c_a$ для автокорреляционной функции, полученным при применении метода коротковременной динамики. Показано, что наличие структурного беспорядка приводит к усилению эффектов старения.

6. Впервые в численном исследовании трехмерной модели Изинга установлено нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы на неравновесном критическом участке динамической эволюции. Впервые получены асимптотические значения флуктуационно-диссипативного отношения $X^{\infty}(p = 1) = 0.381(16)$, $X^{\infty}(p = 0.8) = 0.413(10)$ и $X^{\infty}(p = 0.6) = 0.446(10)$. На основе проведенных исследований установлено, что присутствие структурного беспорядка приводит к увеличению асимптотических значений флуктуационно-диссипативного отношения.

Полученные результаты подтверждают существенное влияние структурных дефектов на критическое поведение спиновых систем с однокомпонентным параметром порядка. Данное исследование существенно расширяет результаты, полученные ранее аналитическими и численными методами, а также обозначает дальнейшие перспективы в моделировании более сложных систем.

# Литература


1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. 3-е издание. - М.:Наука, 1976. - 584 с.

2. Ма Ш. Современная теория критических явлений / Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. - М.:Мир, 1980. - 298 с.

3. Kadanoff L.P. Scaling laws for Ising models near $T_c$ // Physica. - 1966. - V.2. - P. 263-268.

4. Паташинский А.З., Покровский В.А. Флуктуационная теория фазовых переходов. - М.:Наука, 1982 - 383 с.

5. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и $\varepsilon$-разложение / Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. В.К. Федянина. - М.:Мир, 1975. - 256 с.

6. Каданов Л.П. Критические явления, гипотеза универсальности, скейлинг и капельная модель / Квантовая теория поля и физика фазовых переходов. - М.:Мир, 1975. С. 7–32.

7. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Пер. с англ. А.И. Мицека, Т.С. Шубиной; Под ред. С.В. Вонсовского. - М.:Мир, 1973 - 342 с.

8. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.И. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. - М.:Наука, 1984. - 248 с.

9. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. - М.:Наука, 1987. - 264 с.

10. Wilson K.G. // Phys. Rev. B. - 1971. - V. 4. - P. 3174-3184.

11. Wilson K.G. Feynmann-graph exapansion for critical exponents // Phys. Rev. Lett. - 1972. - V.28, issue 9. - P. 548-551.

12. Wilson K.G., Ficher M.E. Critical exponent in $3.99$ dimensions // Phys. Rev. Lett. - 1972. - V. 28, issue 4. - P. 240-241.

13. Amit D. Field theory the renormalization group and critical phenomena / New Yourk: Academic Press: McGraw-Hill, 1978. - 333 p.

14. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Критическая динамика разбавленных магнетиков // ЖЭТФ. - 1992. - Т. 101, вып. 6. - С. 1853-1861.

15. Zinn-Justin J. Quantum field theory and critical phenomena / Oxsford: Clarendon Press, 1996. - 1008 p.

16. Domb C.M., Green M. Phase Transitions and Critical Phenomena: Series Expansion for Lattice Models, Vol. 3 / New York: Academic Press, 1974. - 693 p.

17. Domb C., lebowitz J.L. Phase transitions and critical phenomena, Vol. 20 / New York: Academic Press, 2001. - 201 p.

18. Kleinert H., Schulte-Frohlinde V. Critical Properties of $\varphi^4$-Theories / World Scientific Publishing, 2001. - 512 p.

19. Kleinert H., Schulte-Frohlinde V. Exact five-loop renormalization group functions of $\varphi^4$-theory with $O(N)$-symmetric and cubic interactions // Phys. Lett. B. - 1995. - V. 342. - P. 284.

20. Mayer I. Five-loop expansion for a universal combination of critical amplitudes of the 3D dilute Ising model // Physica A/ - 1998. - V. 252. - P. 450-460.

21. Schloms R, Dohm V. Renormalization-Group Functions and Nonuniversal Critical Behaviour // Europhys. Lett. - 1987. - V. 3. - P. 413.

22. Folk R., Holovatch Yu., Yavors'kii T. Pseudo-$\varepsilon$ expansion of siv-loop renormalization-group functions of an anisotropic cubic model // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62. - P. 12195.

23. Alvarez G., Martin-Mayor V., Ruiz-Lorenzo J.J. Summability of the perturbative expansion for a zero-dimensional disordered spin model // J. Phys. A. - 2000. - V. 33. - P. 841.

24. Jain S. Non-universality in the dynamics at the percolation threshold // J. Phys. A. - 1986. - V. 19. - P. L667-L673.

25. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков // Письма в ЖЭТФ. - 1992. - Т. 55, вып. 12. - С. 709-712.

26. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга// УФН. - 2003. - Т. 173, вып. 2. - С. 175 - 200.

27. Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком // УФН. - 1995. - Т. 165, вып. 5. - С. 481-528.

28. Аплеснин С.С., Рябинкина Л.И., Романова О.Б., Великанов Д.А., Балаев А.Д., Балаев Д.А., Янушкевич К.И., Галяс А.И., Демиденко О.Ф., Бандурина О.Н. Транспортные свойства и ферромагнетизм сульфидов $Co_xMn_{1-x}S$ // ЖЭТФ. - 2008. - Т.133, вып. 4. - С.875-883.

29. Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation process // Z. Phys. B. - Condensed matter. - 1989 - V. 73. - P. 539-549.

30. Huse D. Remanent magnetization decay at the spin-glass critical point: A new dynamic critical exponent for nonequilibrium autocorrelations // Phys. Rev. B. - 1989. - V. 40, issue. 1. - 304 p.

31. Oerding K., Janssen H.K. Nonequilibrium critical relaxation with coupling to a conserved density // J. Phys. A. - 1993. - V. 26. - P. 3369.

32. Oerding K., Janssen H.K. Non-equilibrium critical relaxation with reversible mode coupling // J. Phys. A. - 1993. - V. 26. - P. 5295.

33. Selke W., Shchur L.N. Critical Binder cumulant in two-dimensional anisotropic Ising models // J. Phys. A. - 2005. - V.38. - P.739-744.

34. Berche B., Shchur L.N. Numerical investigation of logarithmic corrections in two-dimensional spin models // Письма в ЖЭТФ. - 2004. - Т.79, вып. 5. - С.267.

35. Godreche C., Krzakala F., Ricci-Tersenghi F. Nonequilibrium critical dynamics of the ferromagnetic Ising model with Kawasaki dynamics // J. Stat. Mech.: Theor. Exp. - 2004. - P.04007.

36. Folk R., Moser G. Critical dynamics: a field-theoretical approach // J. Phys. A: Math. Gen. - 2006. - V.39. - R.207–313.

37. Afzal N., Pleimling M. Aging processes in systems with anomalous slow dynamics // Phys. Rev. E. - 2013. - V. 85, 012114. - P. 1-8.

38. Berthier L., Kurchan J. Non-equilibrium glass transitions in driven and active matter // Nature Physics. - 2013. - V. 9. - P. 310-314.

39. Henkel M., Pleimling M., Lűbeck S. Absorning Phase Transitions. Volume 1 / Non-equilibrium Phase Transitions. - Heidelberg: Springer, 2008. - 387 p.

40. Henkel M., Pleimling M. Ageing and Dynamical scaling far from equilibrium. Volume 2 / Non-equilibrium Phase Transitions. - Heidelberg: Springer, 2010. - 544 p.

41. Cugliandolo L.F. Slow Relaxation and Nonequilibrium Dynamics in Condensed Matter / Les Houches, Ecole d’Ete de Physique Theorique. Vol. 77 - Ed. J.-L. Barrat, Springer: Berlin, 2003. - P. 371.

42. Calabrese P., Gambassi A. Ageing properties of critical systems // J. Phys. A: math. Gen. - 2005. - V. 38. - P. 133-193.

43. Calabrese P., Gambiassi A., Krzakala F. Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // J. Stat. mech. - 2006. - P. 06016.

44. Abriet S., Karevski D. Off equilibrium dynamics in the 3d-XY system // EPJB. - 2004. - V. 41. - P. 79.

45. Calabrese P., Gambassi A. Two-loop Critical Fluctuation-Dissipation ratio for the Relaxation Dynamics of the $O(N)$ landau-Ginzburg Hamiltonian // Phys. Rev. E. - 2002. - V. 66. - P. 066101.

46. Calabrese P., Gambassi A. Aging and fluctuation-dissipation ratio fro the diluted Ising Model // Phys. Rev. B. - 2002. - V. 66. - P. 212407.

47. Krzakala F., Ricci-Tersenghi F. Aging, memory and rejuvenation: some lessons from simple models // J. Phys.: Conf. Ser. - 2006. - V.40. - P.42-49.

48. Grigera T.S., Israeloff N.E. Observation of Fluctuation-Dissipation-Theorem Violations in a Structural Glass // Phys. Rev. Lett. - 1999. - V.83 - P.5038.

49. Cugliandolo L.F., Grempel D.R., Kurchan J., Vincent E. A Search for Fluctuation-Dissipation Theorem Violations in Spin-Glasses from Susceptibility Data // Europhys. Lett. - 1997. - V.48 - P.699.

50. Bellon L., Buisson L., Ciccotti M., Ciliberto S., Douarche F. Thermal Noise Properties of Two Aging Materials / Jamming, Yielding, and Irreversible Deformation in Condensed Matter, 2006. - Springer-Verlag, eds. M. Carmen Miguel, M. Rubi. - 23-25 pp.

51. Herisson D., Ocio M. Fluctuation-dissipation ratio of a spin glass in the aging regime // Phys. Rev. Lett. - 2002. - V.88. - P.257202.

52. Abou B., Gallet F. Probing an nonequilibrium Einstein relation in an aging colloidal glass // Phys. Rev. Lett. - 2004. - V.90. - P.160603.

53. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / Пер. с англ. В.Н. Задкова. - М.:Наука. Физматлит. - 1995. - 144 с.

54. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частяхю Часть 2. / Пер. с англ. - М.:Мир, 1990. - 400 с.

55. Janke W. Monte Carlo Methods in Classical Statistical Physics / Computational Many-Particle Physics. - Springer Berlin Heidelberg, 2008. - PP. 79-140.

56. Аплеснин С.С., Москвин А.И. Моделирование магнитных свойств марганцевого оксида $Pb_3Mn_7O_15$ // ФТТ. - 2009. - Т. 51, вып. 4. - С. 724-726.

57. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena // Physica A. – 1994. – V. 205, – P. 41-65.

58. Antonenko S.A., Sokolov A.I. Critical exponents for a three-dimensional O(n) – symmetric model with n > 3 // Phys. Rev. E. – 1995. – V. 51, N. 3. – P. 1894-1898.

59. Parisi G., Ricci-Tersenghi F., Ruiz-Lorenzo J.J. Universality in the off-equilibrium critical dynamics of the three-dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. E. - 1999. - V. 60. - P. 5191 - 5198.

60. Hasenbach M., Pelissetto A., Vicari E. Relaxation dynamics in 3D randomly diluted Ising models // J. Stat. Mech.: Theory Exp. - 2007. - P. 11009.

61. 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 Mőssbauer spectroscopy // Phys. Rev. B. - 1992 - V. 46. - P. 3452.

62. Криницин А.С., Прудников В. В., Прудников П. В. Расчет динамического критического индекса методом суммирования асимптотических рядов // ТМФ. - 2006. - Т. 147. - С. 137-154.

63. Wegner F.J. Corrections to scaling laws // Phys. Rev. B. - 1972. - V. 5. - P. 4529-4536.

64. Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. - 224 с.

65. Аплеснин С.С. Исследование магнитных свойств слабовзаимодействующих антиферромагнитных цепочек с альтернированным обменным взаимодействием со спином $S = 1/2$ при помощи квантового метода Монте-Карло // ЖЭТФ. - 2000. - Т.117, вып. 1. - С.218-226.

66. Paierls R. On Ising’s Model of Ferromagnetism // Proc. Cambridge. Phil. Soc. - 1936. - V.32. - P.477-481.

67. Kramers H.A., Wannier G.H. Statistic of the Two-Dimensional Ferromagnet // Phys. Rev. - 1941. - V. 60. - P. 252-262.

68. Onsager L. A two-dimensional model with an order-disorder transition // Phys. Rev. - 1944. - V. 65. - P. 117-149.

69. Прудников В.В.,Прудников П.В., Калашников И.А., Циркин С.С. Ренормгрупповое описание процессов неравновесной критической релаксации в коротковременном режиме: трехпетлевое приближение // ЖЭТФ. - 2008. - Т. 133, вып. 6. - С. 1251.

70. Berche B., Berche P.-E., Chatelain C., Janke W. Random Ising model in three dimensions: theory, experiment and simulation - a difficalt coexistence // Cond. Matt. Phys. - 2005. - V. 8. - P. 47-58.

71. Barash L.Yu., Shchur L.N. RNGSSELIB: Program library for random number generation, SSE2 realization // Comput. Phys. Commun. - 2011. - V. 182. - P. 1518-1527.

72. Щур Л.Н. Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний // УФН. - 2012. - Т. 182. - С. 787-792.

73. 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.

74. Hohenberg P.C., Halperin B.I. Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Mod. Phys. - 1977. - V. 49. - P. 435.

75. Stauffer D. Scalingh theory of percolation clusters // Phys. Reports. - 1979. - V. 54, issue 1. - P. 1-74.

76. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theopry / London: Taylor & Fransis, 1985. - 294 p.

77. Stinchcombe R.B. Diluted magnetism / Phase transitions and critical phenomena, ed. C. Domb, J.L. Lebowitz - New York: Academic Press, 1983. - V. 7. - P. 151-191.

78. Fisher M. Renormalization of critical exponent by hidden variables // Phys. Rev. - 1968. - V. 176. - P. 257-272.

79. Хмельницкий Д.Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах // ЖЭТФ. - 1975. - Т. 68, вып. 5. - С. 1960-1968.

80. Weinrib A., Halperin B.I. Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder // Phys. Rev. B. - 1983. - V. 27. - P. 413-427.

81. Дороговцев С.Н. Критические свойства магнетиков с дислокациями и точечными примесями // ЖЭТФ. - 1981. - Т. 80, вып. 5. - С. 2053-2067.

82. Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. - 1974. - V. 7. - P. 1671-1692.

83. Guida R., Zinn-Justin J. Critical exponents of the N-vector model // J. Phys. A: Math. Gen. - 1998. - V. 31. - P.8103.

84. 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.

85. LeGuillou C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // Phys. Rev. B. - 1980. - V. 21. - P.3976.

86. Boyanovsky D., Cardy J.L. Critical behaviour of m-component magnets with correlated impurities // Phys. Rev. B. - 1982. - V. 26. - P. 154-170.

87. Lubensky T.C. Critical properties of random-spin models from of the $\varepsilon$-expansion // Phys. Rev. B. - 1975. - V. 11. - P. 3573-3580.

88. 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.

89. Thurston T.R., Peter C.J., Birgeneau R.J., Horn P.M. Synchrotron magnetic x-ray measurements of the order parameter in $Mn_{0.5}Zn_{0.5}F_2$ // Phys. Rev. B. - 1988. - V. 37. - P. 9559-9563.

90. Li Z., Schűlke L., Zheng B. Finite Size Scaling and Critical Exponents in Critical Relaxation // Phys. Rev. E. - 1996. - V. 53. - P. 2940.

91. Zheng B. Generalized dynamic scaling for critical relaxations // Phys. Rev. Lett. - 1996. - V. 77. P. 679.

92. Schűlke L., Zheng B. Determination of the Critical Point and Exponents from short-time Dynamics // Phys. Lett. A. - 1996. - V. 215. - P. 81-85.

93. Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics // Int. J. Mod. Phys. B. - 1998. - V. 12. - P. 1419-1484.

94. 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.

95. Calabrese P., Martin-Mayor V., Pelissetto A., Vicari E. The three-dimensional randomly dilute Isong model: Monte Carlo results // Phys. Rev. E. - 2003. - V. 68. - P. 036136.

96. 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.

97. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Zheng B., Dorofeev S.V., Kolesnikov V.Y. Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with long-range correlated disorder // Progr. Theor. Phys. - 2007. - V. 117. - P. 973-991.

98. 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.

99. Pleimling M., Gambassi A. Corrections to local scale invariance in the non-equilibrium dynamics of critical systems: numerical evidences // Phys. Rev. B. - 2005. - V. 71. - P. 180401.

100. Jaster A., Mainville J., Schűlke L., Zheng B. Short-tile Critical Dynamics of the 3-Dimensional Ising Model // J. Phys. A.: Math. Gen. - 1999. - V. 32. - P. 1395.

101. Heuer H.-O. Monte Carlo simulation of strongly disordered Ising ferromagnets // Phys. Rev. B. - 1990. - V. 42. - P. 6476; Europhys. Lett. - 1990. - V. 12. - P. 551.

102. Heuer H.-O. Critical crossover phenomena in disordered Ising systems // J. Phys. A. - 1993. - V. 26. - L. 333.

103. Pelissetto A., Vicari E. randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62. - P. 6393.

104. Прудников В.В., Прудников П.В., Калашников И.А., Рычков М.В. Неравновесная критическая релаксация структурно неупорядоченных систем в коротковременном режиме: ренормгрупповое описание и компьютерное моделирование // ЖЭТФ. - 2010. - Т. 137, вып. 2. - С. 286-300.

105. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Бабаев А.Б. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с вмороженным беспорядком на кубической решетке // ЖЭТФ. - 2004. - Т. 126, вып. 6. - С. 1377.

106. Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло // УФН. - 2006. - Т. 176, вып. 10. - С. 1119-1124.

107. Schehr G., Paul R. Non-equilibrium critical dynamics in disordered ferromagnets // Phys. Rev. E. - 2005. - V. 72. - P. 016105.

108. Oerding K., Janssen H.K. Non-equilibrium Critical Relaxation in Dilute Ising systems // J. Phys. A.: Math. Gen. - 1995. - V. 28. - P. 4271.

109. Rosov N., Kleinhammes A., Lidbjork P., Hohenemser C., Eibschutz M. Single-crystal Mőssbauer measurement of the critical exponent beta in the random-exchange Ising system $Fe_{0.9}Zn$ // Phys. Rev. B. - 1992 - V. 37. - P. 3265.

110. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. Field-theory approach to critical behaviour of systems with long-range correleted defects // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 82. - P. 8777.

111. Alves N.A., Da Silva R., Drugowich de Felicio 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.

112. Berthier L., Holdsworth P.C.W., Sellitto M. Nonequilibrium critical dynamycs of the two-dimensional XY model // J. Phys. A. - 2001. - V. 34. - P. 1805.

113. Ricci-Tersenghi F. Measuring the fluctuation-dissipation ratio in glassy systems with no perturbing field // Phys. Rev. E. -2003. - V. 68. - P. 065104.

114. Chatelain C. A far-from-eqilibrium fluctuation-dissipation relation for an Ising-Glauber-like model // J. Phys. A. - 2003. - V. 36. P. 10739.

115. Chatelain C. On universality in aging ferromagnets // J. Stat. Mech. - 2004. - P. 06006.

116. Godreche C., Luck J.M. Response of non-equilibrium systems at criticality: exact results for the Glauber-Ising chain // J. Phys. A: Math. Gen. - 2000. - V. 33. - P. 9141.