

Поспелов Евгений Анатольевич

**ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНОГО
КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СТРУКТУРНО
НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ**

01.04.02 – теоретическая физика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Омск – 2014

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Прудников Владимир Васильевич.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник, профессор
Щур Лев Николаевич.

Ведущая организация: Институт физики им. Х.И. Амирханова
ДагНЦ РАН, г. Махачкала.

Защита состоится «___» ***** 2014 г. в ___ часов на заседании
диссертационного совета Д ***.***.** при *****
***** по адресу: ****, г. ****, ****, ***.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО
"Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского".

Автореферат разослан «___» ***** 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д ***.***.**

Общая характеристика работы

Актуальность темы

В реальных макроскопических системах всегда присутствуют те или иные дефекты. Структурные дефекты могут иметь различную природу и оказывать различное влияние на процессы, протекающие в твердых телах. 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.

Причина, по которой влияние дефектов структуры на критическое поведение систем может быть существенным, связана с тем, что за счет сингулярного поведения функций отклика (восприимчивости) любое, даже слабое возмущение, вносимое дефектами структуры, может привести к большим эффектам вблизи критической точки, заметно изменяя критическое поведение "чистой" (однородной) системы. Возникающий при этом новый тип критического поведения структурно неупорядоченных систем будет характеризоваться набором значений критических показателей, отличающихся от значений аналогичных показателей для "чистой" системы.

Ренормгрупповой анализ с использованием ϵ -разложения [1] показал, что критическое поведение структурно 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 ϵ -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 трехмерной решетки соответствует концентрациям спинов ≈ 0.69), примеси могут образовывать связанную структуру. Влияние этого примесного перколяционного порога до сих пор остается открытой проблемой.

В окрестности температуры T_c фазового перехода второго рода время релаксации является расходящейся величиной: $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Таким образом, системы в критической точке не достигают равновесия в течение всего релаксационного процесса. Для чистых систем В работах [2, 3] было проведено численное исследование методами Монте-Карло критической динамики трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. В работе [2] получено значение динамического критического индекса $z = 2.62$, а в [3] — $z = 2.35(2)$ 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 (Rosov N. et al., 1992) для слабо разбавленного изингоподобного магнетика $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$. В работе [4] бы-

ло 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 трехпетлевом приближениях с применением к рядам теории различных методов суммирования, хорошо согласующиеся в рамках погрешностей с результатами экспериментального исследования. В работах Вакилова и Прудникова [5, 6] 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.

Другой особенностью поведения систем в критической области является их аномально медленная динамика. В связи с этим могут возникать необычные свойства их неравновесного поведения, проявляющиеся в случае, когда время релаксации системы к равновесному термодинамическому состоянию велико или недостижимо в течении времени экспериментального исследования. Особый интерес 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 [7]. В то же время, данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [8, 9], 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.

Ренормгрупповые расчеты предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ в рамках метода ε - разложения для диссипативной модели с не сохраняющимся параметром порядка были проведены в работах [10, 11]. 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^∞ для структурно неупорядоченной и бездефектной моделей Изинга.

Цель работы

Целью настоящей диссертации является

— 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.

- численное исследование методом коротковременной динамики процесса критической эволюции трехмерной неупорядоченной модели Изинга. Определение значений для независимых динамических θ' , z и статических β , ν критических индексов с учетом ведущих поправок к скейлингу.
- 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.
- исследование нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы для трёхмерной структурно неупорядоченной модели Изинга. Расчет предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ и выявление влияния структурного беспорядка на его значение.

Научная новизна результатов

1. 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.
2. Впервые определено асимптотическое значение критического показателя θ' для структурно неупорядоченной модели Изинга с учетом ведущих поправок к скейлингу. Проведенные численные исследования показали, что неравновесное критическое поведение слабо и сильно неупорядоченных систем принадлежит к различным классам универсальности с не совпадающими в пределах погрешностей значениями динамических критических индексов θ' и z .
3. Впервые осуществлено численное исследование эффектов старения в однородной и структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга в критической области. Полученные результаты двухвременных зависимостей автокорреляционной функции и функции отклика доказывают существование эффектов старения в неравновесной эволюции трехмерной модели Изинга и что наличие структурного беспорядка приводит к усилению эффектов старения.
4. Впервые численно исследовано нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы для однородной и структурно неупорядоченной модели Изинга.
5. Впервые в численном исследовании получены значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для трехмерной модели Изинга. Полученные значения указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении чистых и структурно неупорядоченных систем, а также на то, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению значений X^∞ .

Научная и практическая значимость работы

Исследование влияния структурного беспорядка на критическое поведение различных систем представляет фундаментальный интерес с точки зрения тео-

рии 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.

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.

Личный вклад диссертанта

Разработаны программы моделирования неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга в коротковременном режиме, осуществлен анализ полученных результатов, проведено сопоставление с ранее полученными результатами других исследователей. Разработаны программы расчета флуктуационно-диссипативного отношения для трехмерной неупорядоченной модели Изинга.

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.

Апробация работы Основные результаты диссертационной работы 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 Список публикаций автора по теме диссертации включает 13 статей и тезисов докладов, опубликованных в российских и иностранных журналах, сборниках трудов и материалах конференций.

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, четырех глав, и заключения. Объем диссертации – * * * страниц машинописного текста, в том числе ** рисунков, ** таблиц, и список цитируемой литературы из * * * наименований.

Краткое содержание работы

Во введении дается обоснование выбранной темы и сформулированы основные цели исследований.

В первой главе, носящей обзорный характер, в краткой форме излагаются основные идеи и методы, применяемые для описания критических явлений. Рассматриваются особенности численного исследования структурно неупорядоченных систем. Описываются эффекты старения и эффекты нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы. Представлен обзор существующих достижений в данной области.

Согласно критерию Харриса (Harris A. B., 1974), примеси влияют на критическое поведение системы только в том случае, когда теплоемкость бездефектной системы является расходящейся величиной. В этом случае проявляется новый класс универсальности критического поведения структурно неупорядоченных систем со значениями показателей, отличными от их значений для однородной системы. При описании фазового перехода второго рода данному критерию удовлетворяют только изингоподобные системы.

Характерными особенностями неравновесного поведения систем при фазовом переходе II рода являются критическое замедление времени релаксации и аномально большие времена корреляции их различных состояний. Указанные особенности приводят к реализации динамического скейлингового поведения в состояниях, термодинамически далеких от равновесного. Так, в работе (Janssen H. K. et al, 1989) предсказывалось, что для ферромагнитной системы в начальном состоянии с высокой хаотизацией спинов (малая начальная намагниченность), релаксация на макроскопически малых временах характеризуется не спаданием, а возрастанием намагниченности системы. Это возрастание характеризуется новым независимым динамическим критическим индексом θ' : $m(t) \sim t^{\theta'}$. Также предсказывалось двухвременная зависимость корреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика на внешнее возмущение $R(t, t_w)$.

Важную роль в поведении реальных материалов и физических систем играет структурный беспорядок. Присутствие примесей или других дефектов структуры приводит к наличию в гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, задающих начальное состояние неупорядоченной системы. Эти факторы могут оказать существенное влияние на фазовые переходы второго рода: задать новые классы универсальности критического поведения и модифицировать кинетические свойства систем. Типичными и важными примерами подобных систем являются неупорядоченные магнитные системы с примесью немагнитных атомов. Присутствие структурного беспорядка создает значительные трудности как для аналитического описания различных систем, так и для численного исследования их динамической эволюции.

В результате проведенных исследований методами ренормализационной группы и методами Монте-Карло было показано, что малое разбавление $(1 - p) \ll 1$ трехмерной модели Изинга случайно распределенными дефектами приводит к новому типу критического поведения. Слабо неупорядоченные системы имеют свой класс универсальности, характеризующийся набором статических и динамических критических индексов, отличных от однородных систем. В то же время одним из актуальных вопросов остается вопрос о критическом поведении систем с сильным разбавлением. Согласно теории перколяции, при значениях спиновой концентрации p , меньших порога примесной перколяции p_c^{imp} , можно ожидать существования связанных примесных структур внутри спиновой системы. Для трехмерной неупорядоченной модели Изинга порог примесной перколяции равен $p_c^{imp} \approx 0.69$.

Во второй главе осуществлено численное исследование влияния точечных случайно распределенных дефектов структуры на неравновесное критическое поведения слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Исследовано критическое поведение систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и 0.8 .

Для исследования неравновесного критического поведения системы был использован метод коротковременной динамики (МКД). Данный метод основан на существовании универсальной временной зависимости в поведении термодинамических характеристик на относительно малых макроскопических временах на этапе динамической эволюции, когда система еще не достигла состояния термодинамического равновесия.

Основы МКД изложены в работе Янссена (Janssen H. K. et al, 1989), в которой предсказывается существование универсального критического поведения систем на ранних этапах эволюции с $t_{mic} < t \ll t_{rel}$, где t_{mic} - некоторый микроскопический временной интервал, малый в макроскопическом смысле, а t_{rel} - время релаксации. На этих временах для k -го момента намагниченности для системы, помещенной при $t = 0$ в состояние вблизи критической точки, реализуется следующая скейлинговая временная зависимость

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

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 значе-

ния намагниченности m_0 .

Случай с малой начальной намагниченностью системы $m_0 \ll 1$. На начальной стадии динамической эволюции корреляционная длина еще достаточно мала, поэтому влияние конечного размера системы не является существенным. Полагая линейный размер системы L достаточно большим, и выбирая масштабный фактор $b = t^{1/z}$, намагниченность из уравнения (1) (при $k = 1$) для $m_0 t^{1/z} \ll 1$ представим в виде

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

где показатель $\theta' = (x_0 - \beta/\nu)/z$ используется как независимый динамический критический индекс. В критической точке $\tau \rightarrow 0$ и для достаточно малого промежутка времени намагниченность имеет временную зависимость

$$m(t) \sim t^{\theta'}. \quad (3)$$

Выражение (3) показывает, что намагниченность системы при начальном состоянии с малой намагниченностью m_0 характеризуется возрастанием на раннем этапе неравновесной релаксации. Временной интервал возрастания намагниченности оценивается как $t_{cr} \sim m_0^{-z/x_0}$, который на временах $t \gg t_{cr}$ сменяется степенным законом спадаения намагниченности $m(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$.

Используя уравнение (1), при $m_0 \rightarrow 0$ можно получить временную зависимость второго момента намагниченности в виде

$$m^{(2)}(t) \sim t^{-2\beta/\nu z} M^{(2)}(1, t^{-1/z} L). \quad (4)$$

На начальном этапе неравновесного режима пространственная корреляционная длина ещё достаточно мала, в том числе и в критической области. Тогда второй момент намагниченности можно оценить как $M^{(2)}(1, t^{-1/z} L) \sim L^{-d}$, d - размерность системы. Подставляя в (4), получаем следующую временную зависимость

$$m^{(2)}(t) \sim t^{-c_2}, c_2 = (d - \frac{2\beta}{\nu}) \frac{1}{z}. \quad (5)$$

Для системы с начальным состоянием $m_0 \rightarrow 0$ показывается, что автокорреляционная функция $C(t)$ имеет временную зависимость

$$C(t) \sim t^{-c_a}, c_a = \frac{d}{z} - \theta'. \quad (6)$$

Случай начального состояния системы с сонаправленными спинами $m_0 = 1$. При $m_0 = 1$ и $b = t^{1/z}$ из (1) получаем намагниченность в виде

$$m(t, \tau) \sim t^{-\beta/\nu z} \left(1 + At^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2) \right). \quad (7)$$

В критической точке при $\tau = 0$ временная зависимость намагниченности имеет вид

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (8)$$

Исследование низкотемпературного начального состояния позволяет получить критические показатели β , ν , z

Моделирование проводилось на трехмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ и наложенными периодическими граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Изинга имеет вид

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (9)$$

где $J > 0$ - интеграл обменного взаимодействия, S_i - спин в узле i равный ± 1 , p_i - числа заполнения, характеризующие наличие в системе некоррелированного беспорядка. Сумма $\langle i, j \rangle$ берется только по ближайшим соседям. Числа заполнения p_i принимают значение 1, если в узле находится спин, и 0 - если немагнитный атом примеси, и характеризуются 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 в течении всего времени расчета.

Численное моделирование осуществлялось с помощью алгоритма Метрополиса. Алгоритм Метрополиса, реализующий динамику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели A в классификации Гальперина-Хоэнберга (Р. С. Hohenberg, В. I. Halperin, 1977) и позволяет провести сравнение получаемых в результате моделирования неравновесного критического поведения системы динамических критических индексов с результатами ренормгруппового описания для данной модели.

При исследовании МКД возможен выбор двух типов неравновесных начальных состояний, а именно состояний с начальной намагниченностью $m_0 = 1$ или $m_0 \ll 1$. Первое из них называют *низкотемпературным* начальным состоянием, поскольку система из одинаково ориентированных спинов соответствует основному состоянию с температурой $T = 0$. Состояние с $m_0 \ll 1$ соответствует парамагнитной фазе при $T \gg T_c$ и называется *высокотемпературным*. В процессе моделирования рассчитывались намагниченность

$$m(t) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_i^{pL^3} p_i S_i(t) \right\rangle \right], \quad (10)$$

ее второй момент

$$m^{(2)}(t) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_i^{pL^3} (p_i S_i(t))^2 \right\rangle \right], \quad (11)$$

и автокорреляционная функция

$$C(t) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_i^{pL^3} p_i S_i(t) S_i(0) \right\rangle \right]. \quad (12)$$

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

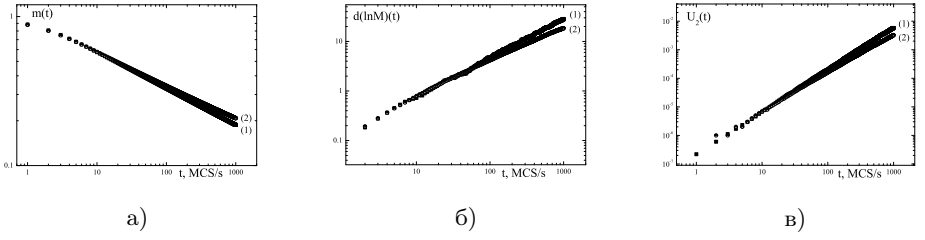


Рис. 1: Временная зависимость намагниченности (а)), её логарифмической производной (б)) и кумулянта U_2 (в)) для спиновых концентраций $p = 0.95(1)$ и $p = 0.8(2)$.

временная зависимость при $T = T_c$ характеризуется степенным поведением вида:

$$\partial_\tau \ln m(t) \sim t^{1/\nu z}, \quad U_2(t) \sim t^{d/z}. \quad (13)$$

В качестве единицы времени в численных исследованиях критических явлений используется шаг Монте-Карло на спин - MCS/s, под которым понимается интервал времени пробного переворота всех спинов системы. Поведение системы исследовалось на временах до 1000 MCS/s. Использовались критические температуры $T_c(p = 0.95) = 4.26267(4)$ и $T_c(p = 0.8) = 3.49948(18)$, определенные в работе [12].

При моделировании эволюции из низкотемпературного начального состояния $m_0 = 1$ вычислялись значения намагниченности $m(t)$ (10) и её второго момента $m^{(2)}(t)$ (12), используемого для определения кумулянта U_2 (13) 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. Для вычисления логарифмической производной $\partial_\tau \ln m(t)$ осуществлялся расчет намагниченности для двух температур, смещенных относительно T_c на интервал $\Delta T = \pm 0.005$. Полученные временные зависимости представлены на рис. 1.

В слабо неупорядоченных системах с $p = 0.95; 0.80$ в отличие от поведения однородных систем было выявлено два универсальных динамических режима со степенным временным изменением $m(t)$, $U_2(t)$ и $\partial \ln m(t)$, 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, реализуется режим поведения неупорядоченной системы.

Исследования МКД показали, что конечность моделируемой системы сказывается на поведении термодинамических функции даже в критической точке, вызывая отклонение от степенных зависимостей. Для получения корректных значений критических показателей необходим учет поправок к скейлингу в соотношениях для степенных законов. В данной диссертации для определения критических индексов была реализована процедура учета ведущих поправок к скейлингу. Для этого исследуемые функции ($m(t)$, $U_2(t)$ и др.) аппроксимировались выражением

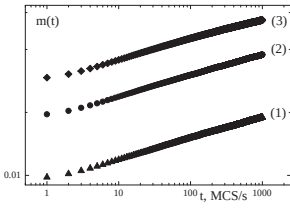
$$X(t) = t^\delta (A + Bt^{-\omega/z}), \quad (14)$$

где $A(p)$ и $B(p)$ - не универсальные амплитуды, зависящие от исследуемой величины и спиновой концентрации. Для определения показателей d/z , ω , $\beta/\nu z$ на временном интервале, соответствующем влиянию дефектов структуры, применялась следующая процедура учета ведущих поправок к скейлингу: 1) исследуемый временной интервал $[t_0; t_1]$ разбивался на все возможные интервалы с длительностью $\Delta t = 50, \dots, (t_1 - t_0)$; 2) выбирались значения ω/z с шагом 0.005; 3) на каждом временном интервале Δt для каждого значения ω/z осуществлялась аппроксимация полученных величин выражением (14) методом наименьших квадратов для набора значений δ ; 4) выбирались интервалы, на которых достигался минимум аппроксимационной погрешности; 5) производилось усреднение выбранных на разных интервалах значений δ для конкретного ω/z и расчет погрешностей скейлинговой процедуры.

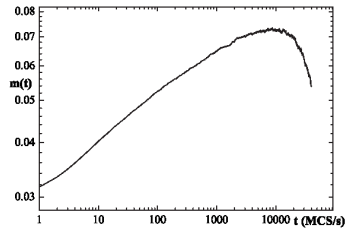
С учетом ведущих поправок к скейлингу были определены для систем с $p = 0.95$ динамический критический индекс $z = 2.185(25)$, отношение статических критических индексов $\beta/\nu = 0.533(13)$, критические индексы $\nu = 0.668(14)$, $\beta = 0.356(11)$ и усредненные значения критического индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.369(92)$, для систем с $p = 0.80$ значения соответствующих критических индексов $z = 2.208(32)$, $\beta/\nu = 0.508(17)$, $\nu = 0.685(21)$, $\beta = 0.348(11)$ и $\omega = 0.404(110)$. Сопоставление полученных значений критических индексов для слабо неупорядоченных систем показывает, что они принадлежат к одному универсальному классу систем со значениями, совпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований.

Для системы с $p = 0.8$ было проведено исследование критической эволюции из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$. В рамках данного исследования осуществлялся расчет намагниченности для систем с различными начальными состояниями с $m_0 = 0.01, 0.02$ и 0.03 . Полученные кривые использовались для определения критического индекса θ' . Для определения показателя z и отношения индексов β/ν были рассчитаны автокорреляционная функция и второй момент намагниченности при моделировании из начального состояния с $m_0 = 0.0001$. Термодинамическое усреднение проводилось по 1000 примесным конфигурациям. Каждая конфигурация дополнительно усреднялась по 25 прогонкам - реализациям выбранного начального состояния с малой намагниченностью.

Для определения показателя θ' необходимо получить его асимптотическое значение для $m_0 \rightarrow 0$. Для этого проводилось измерение намагниченности для трех разных начальных состояний с $m_0 \ll 1$, вычислялись соответствующие показатели $\theta'(m_0)$, а затем определялось значение показателя $\theta'(m_0 \rightarrow 0)$. Временная зависимость намагниченности при моделировании из различных начальных состояний приводится на рис. 2, а). В работе Янссена было также показано, что начальный рост намагниченности сменяется степенным спаданием, характеризуемым зависимостью $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. Для проверки был осуществлен расчёт намагниченности для системы с концентрацией спинов $p = 0.8$, начальной намагниченностью $m_0 = 0.03$ на временах до 40000 MCS/s. Полученная зависимость приведена на рис. 2, б). Показано, что намагниченность действительно возрастает на начальном этапе эволюции ($t \sim 8000$ MCS/s, затем следует кроссоверный

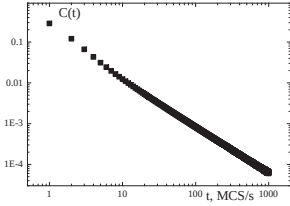


а)

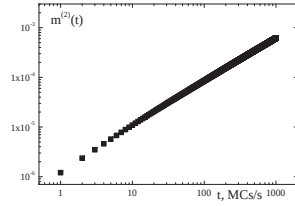


б)

Рис. 2: а) Временная релаксация $m(t)$ для начальных состояний с $m_0 = 0.01(1), 0.02(2)$ и $0.03(3)$. б) Эволюция намагниченности для $m_0 = 0.03$.



а)



б)

Рис. 3: Временная релаксация намагниченности для автокорреляционной функции а) и второго момента намагниченности б).

этап $t \sim 9000 - 11000$ MCS/s, который сменяется спаданием намагниченности.

Аналогично случаю низкотемпературного начального состояния, было выявлено два универсального режима критического поведения. При исследовании поведения намагниченности $m(t)$, автокорреляционной функции $C(t)$ (рис. 3, а)) и второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ (рис. 3, б)) были выделены два временных интервала: $t < 90$ MCS/s, на котором поведение системы аналогично однородной модели, и $t > 100$ MCS/s, на котором проявилось влияния структурной неупорядоченности. На первом этапе эволюции были вычислены значения критических показателей $z = 2.065(14)$, $\theta' = 0.106(2)$ и отношение $\beta/\nu = 0.534(6)$, значения которых хорошо соотносится с полученными в [13] критическими индексами при исследовании однородной системы.

После проведения процедуры учета ведущей поправки к скейлингу, были определены значения критических показателей $\theta' = 0.127(16)$, $z = 2.191(21)$, $\beta/\nu = 0.504(14)$ и $\omega = 0.256(55)$.

Сравнение полученных показателей $\theta' = 0.127(16)$ и $z = 2.191(21)$ со значениями $\theta' = 0.108(2)$ и $z = 2.042(6)$ для бездефектных систем [13] позволяют считать, что наличие замороженного структурного беспорядка в изингоподобных системах приводит к еще большим, по сравнению с однородными системами, эффектам критического замедления и влиянию неравновесных начальных состояний на эволюцию системы. Показано, что слабо неупорядоченные системы демонстрируют два этапа критической релаксации: на малых временах пове-

дение системы соответствует однородной модели, и затем после кроссового участка реализуется критическое поведение неупорядоченной системы. Итоговые значения полученных критических показателей в сопоставлении с результатами других работ приведены в табл. 4.

В третьей главе проведено исследование методом коротковременной динамики неравновесного критического поведения сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга при различных начальных состояниях как с $m_0 = 1$, так и с $m_0 \ll 1$. Определены критические показатели для систем со спиновой концентрацией $p = 0.6$ и $p = 0.5$.

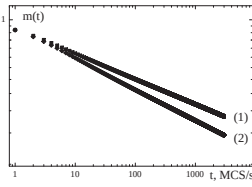
Для определения динамического показателя z был дополнительно осуществлен расчёт кумулянта $F_2(t) = \frac{m^2(t)|_{m_0=0}}{(m(t)|_{m_0=1})^2}$, в котором используются данные об эволюции намагниченности из различных начальных состояний: $m_0 = 1$ и $m_0 \ll 1$. Его временная зависимость определяется выражением

$$F_2(t) \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)\frac{1}{z}}}{t^{-2\beta/\nu}} \sim t^{-d/z}. \quad (15)$$

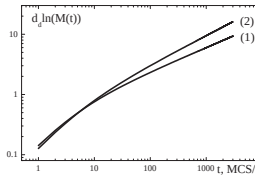
Моделирование проводилось на трехмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ с наложенными периодическими граничными условиями. При исследовании поведения систем из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$ для расчета показателя θ' для системы с $p = 0.5$ были использованы начальные состояния с намагниченностью $m_0 = 0.0005, 0.00075$ и 0.001 ; для системы с $p = 0.6$ - $m_0 = 0.0005, 0.001$ и 0.005 . Вычисление автокорреляционной функции и второго момента намагниченности проводилось для системы с $m_0 = 0.00001$. Моделирование проводилось на временах до 3000 MCS/s. Статистика исследования составила 10000 примесных конфигураций, при этом каждая примесная конфигурация дополнительно усреднялась по 25 прогонам - для получения статистического усреднения по реализации требуемого начального состояния с $m_0 \ll 1$. Использовались критические температуры $T_c(p = 0.5) = 1.84509(6)$ и $T_c(p = 0.6) = 2.42413(9)$, полученные в работе [12].

При моделировании систем из низкотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 1$ проводилось вычисление намагниченности $m(t)$, ее логарифмической производной $\partial_\tau \ln m(t)$ и кумулянта U_2 . Анализ временных зависимостей указанных величин позволяет определить критические показатели β, ν и z в соответствии со степенными зависимостями (8, 13). На рисунке 4, а) приводятся кривые релаксации намагниченности из низкотемпературного начального состояния для систем со спиновой концентрацией $p = 0.5$ и $p = 0.6$.

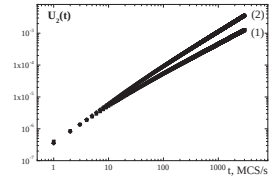
В отличие от слабо неупорядоченных систем, анализ различных термодинамических характеристик, таких как намагниченность, кумулянт U_2 или автокорреляционная функция, не выявил существования отдельного универсального режима критической эволюции, на котором поведение системы соответствовало бы однородной модели. На рисунке 4 (б), в)) приведены полученные временные зависимости логарифмической производной $\partial_\tau \ln m(t)$ и кумулянта U_2 . К каждой полученной кривой была применена процедура учета ведущей поправки к скейлингу (14). Полученные значения критических индексов β, ν и z приведены в таб. 1.



а)



б)

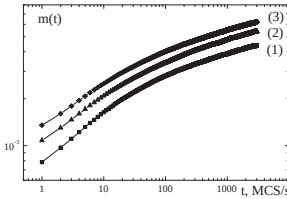


в)

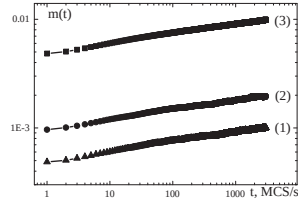
Рис. 4: Временная зависимость намагниченности (а)), её логарифмической производной $\partial_t \ln M(t)$ (б)) и кумулянта U_2 (в)) для спиновых концентраций $p = 0.5(1)$ и $p = 0.6(2)$.

При моделировании из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$ проводилось измерение намагниченности, ее второго момента, автокорреляционной функции и кумулянта F_2 (10 - 12, 15). На основе скейлинговых соотношений (4) - (7, (15)) осуществлялся расчет динамических критических индексов θ' и z , а также отношения статических индексов β/ν .

На рис. 5 представлены временные зависимости намагниченности для различных начальных состояний m_0 для систем с концентрацией спинов $p = 0.5$ и $p = 0.6$. Как видно из графиков, для всех систем наблюдается возрастание намагниченности, предсказываемое МКД. Временные зависимости автокорреляционной функции, второго момента намагниченности и кумулянта F_2 демонстрируются на рис. 6. Для расчёта критических показателей к полученным при моделировании данным была применена процедура учета ведущих поправок к скейлингу (10). Полученные значения критических индексов приведены в табл. 1. Системы со спиновыми концентрациями $p = 0.5$ и 0.6 демонстрируют хорошее согласие критических индексов в пределах погрешности. Таким образом, критическое поведение данных систем принадлежит к одному классу универсальности. Сравнение динамических критических индексов θ' и z с полученными во второй главе результатами $\theta' = 0.127(16)$ и $z = 2.191(21)$, а также с результатами исследования однородной системы [13] $\theta' = 0.108(2)$ и $z = 2.041(18)$ показывает, что критическое поведение сильно неупорядоченных систем характеризуется своим классом универсальности, отличным от случая слабого разбавления. Значения критического показателя z , определяющего рас-



а)



б)

Рис. 5: Временная зависимость намагниченности а) $p = 0.5$, $m_0 = 0.0005(1)$, $0.0075(2)$ и $0.001(3)$. б) $p = 0.6$, $m_0 = 0.0005(1)$, $0.001(2)$ и $0.005(3)$.

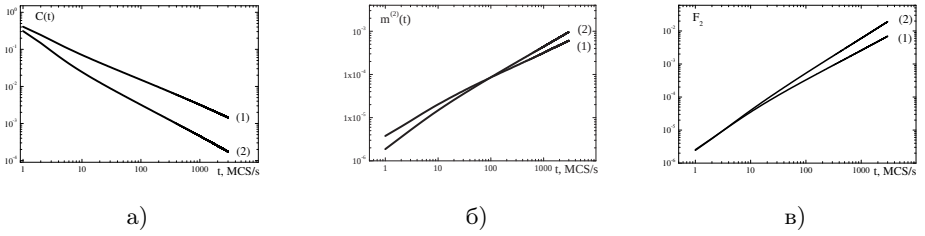


Рис. 6: Временная зависимость автокорреляционной функции (а), второго момента намагниченности (б) и кумулянта F_2 в двойном логарифмическом масштабе. (1)- $p = 0.5$, (2) - $p = 0.6$

Таблица 1: Значения критических показателей сильно неупорядоченной системы с учетом ведущей поправки к скейлингу.

Показатель	$p = 0.5$	$p = 0.6$
Низкотемпературное начальное состояние $m_0 = 1$		
β	0.314(28)	0.354(30)
ν	0.711(47)	0.707(46)
z	2.655(55)	2.560(41)
β/ν	0.442(30)	0.501(32)
$(\omega/z)_{av}$	0.105(18)	
Высокотемпературное начальное состояние $m_0 \ll 1$		
θ'	0.192(26)	0.194(41)
z	2.736(97)	2.756(113)
$z(F_2)$	2.647(49)	2.627(41)
β/ν	0.430(53)	0.479(58)
$(\omega/z)_{av}$	0.144(44)	

ходимость времени релаксации в критической точке $\tau_{rel} \sim |T - T_c|^{-\nu z}$, показывают, что при концентрациях примесей ниже порогового значения примесной перколяции происходит усиление эффектов критического замедления. В таблице 4 приводится сравнение результатов данной главы с результатами других работ по аналитическим исследованиям методами ренорм-группы, численным исследованиям методами Монте-Карло и экспериментальным исследованиям.

В четвёртой главе проведено исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в трехмерной модели Изинга. Представлен анализ двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика на внешнее магнитное поле для однородной (концентрация спинов $p = 1$), слабо неупорядоченной ($p = 0.8$) и сильно неупорядоченной ($p = 0.6$) систем.

Старение материалов характеризуется увеличением времени релаксации системы к состоянию равновесия с увеличением "возраста" образца, т.е. времени прошедшего после его приготовления [14]. Эффекты старения наиболее ярко проявляются в системах с медленной динамикой, отличающихся аномально большими временами релаксации. Примером подобных систем являются фер-

ромагнетики в окрестности критической точки фазового перехода второго рода, характеризующиеся расходящейся температурной зависимостью времени релаксации $t_{\text{rel}} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Следовательно, в критической точке система не достигает равновесия в течении всего релаксационного процесса. На временах $t \ll t_{\text{rel}}$ и ожидается проявление эффектов старения. Они выражаются в существовании двухвременных зависимостей для 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 $t - t_w$. При явлении старения процесс спадания корреляционной функции с увеличением времени наблюдения характеризуется замедлением с ростом времени ожидания.

Другим интересным явлением, обнаруженным в системах с медленной динамикой, является нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ). ФДТ связывает функцию отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w} \quad (16)$$

где $X(t, t_w)$ - флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО). ФДТ утверждает, что в равновесном состоянии $X(t > t_w \gg t_{\text{rel}}) = 1$. Предельное значение

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) \quad (17)$$

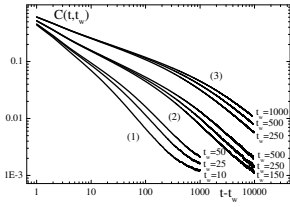
используется в качестве новой универсальной характеристики для неравновесного критического поведения различных систем.

В данной главе проведено исследование 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 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 [12]. После получения начальной конфигурации, система помещалась в критическую точку и свободно эволюционировала до времени t_w , после чего осуществлялся расчёт 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 прогонам.

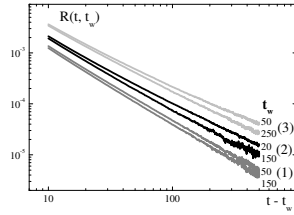
Автокорреляционная функция определялась по формуле

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_i p_i S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle. \quad (18)$$

Для её расчёта моделировалась динамика системы с помощью алгоритма Метрополиса. Вероятность переворота спина определялась выражением $W^{\text{metrop}} =$



а)



б)

Рис. 7: Зависимость $C(t, t_w)$ (а) и $R(t, t_w)$ (б) для различных времен ожидания. (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$

$\min(1, \exp(-\frac{\Delta H}{T}))$. Однако при реализации алгоритма Метрополиса, функция отклика на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ не может быть получена численно. Для выявления эффектов старения в поведении $R(t, t_w)$ была использована методика расчета, основанная на моделировании с помощью динамики тепловой бани (heat-bath dynamics) [15].

Динамика тепловой бани наряду с алгоритмом Метрополиса представляет собой одну из численных реализаций динамики Глаубера для исследуемой системы. Вероятность переворота спина в данной динамике определяется посредством выражения

$$W^{hb}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp(-H(S'_i)/T)}{\sum_{S_j} \exp(-H(S_j)/T)}, \quad (19)$$

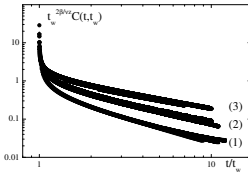
где суммирование по S_j в знаменателе проводится по всем возможным состояниям спина. Существенным различием является то, что производная W^{hb} является непрерывной функцией от ΔH , в отличие от W^{metrop} . Для определения функции отклика системы в работе [15] было рассчитано влияние малого внешнего магнитного поля $h \rightarrow 0$, приложенного к системе на временном интервале $[t_w; t_w + 1]$. В этом случае аналитически может быть получена функция откли-

ка $R_{ji}(t, t_w) = \left. \frac{\partial \langle S_j(t) \rangle}{\partial h_i} \right|_{h_i \rightarrow 0}$. В данную производную зависимость от поля входит через вероятность переворота отдельного спина (19). Вычисление производной приводит к итоговой формуле для расчета функции отклика в пределе $h_i \rightarrow 0$

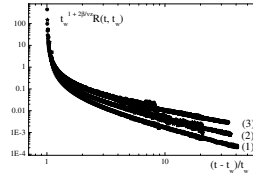
$$R(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_{ii} = \frac{1}{NT} \sum_{i=1}^N \left\langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \right\rangle, \quad (20)$$

в которой $S_i^W = \text{th} \left(\frac{J}{T} \sum_{k \neq i} S_k \right)$.

На рис. 7 представлены зависимости автокорреляционной функции и функции отклика от времени наблюдения $t - t_w$. Как видно из графиков, в двухвременном поведении данных функций можно выделить несколько режимов. На этапе $t - t_w \ll t_w$ отсутствует зависимость от времени ожидания $C(t, t_w) =$



а)



б)

Рис. 8: Скейлинговые зависимости для $C(t, t_w)$ (а)) и $R(t, t_w)$ (б)). (1) - $p = 1$, (2) - $p = 0.8$, (3) - $p = 0.6$

$C(t - t_w)$, $R(t, t_w) = R(t - t_w)$ и реализуется квазиравновесный режим. На достаточно больших временах наблюдения и ожидания, но сравнимых друг с другом $t - t_w \sim t_w \gg 1$, в $C(t, t_w)$ и $R(t, t_w)$ проявляется зависимость от t_w , характеризующая эффекты старения. На этом этапе была проведена аппроксимация автокорреляционной функции зависимостью $C(t, t_w) \sim (t - t_w)^{-\lambda}$. Полученные значения λ приведены в табл. 2, которые указывают на замедление эволюции системы с ростом t_w , при этом увеличение концентрации дефектов приводит к усилению эффектов старения.

Таблица 2: Значения показателя λ , $C(t, t_w) \sim (t - t_w)^\lambda$ на этапе $t - t_w \sim t_w \gg 1$.

t_w	λ	t_w	λ	
	$p = 1$		$p = 0.8$	$p = 0.6$
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)

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

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/\nu z} F_C(t/t_w), \\ R(t, t_w) &\sim t_w^{-1-2\beta/\nu z} F_R(t/t_w). \end{aligned} \quad (21)$$

Для её 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 приведен на рис. 8, который демонстрирует "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 $F_R(t/t_w)$. Для системы с $p = 1$ при построении зависимостей были использованы показатели: $\beta/\nu = 0.517(2)$, $z = 2.042(6)$ [13], для $p = 0.8$ - $\beta/\nu = 0.504(14)$, $z = 2.191(21)$ (вторая глава данной диссертации), для $p = 0.6$ - $\beta/\nu = 0.460(31)$, $z = 2.657(34)$ (третья глава данной диссертации). На временах $(t - t_w) \gg t_w$ скейлинговые функции $F_{C|R}$ из (21) характеризуются зависимостью $F_{C|R} \sim A_{C|R}(t/t_w)^{-c_{a|r}}$. 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 θ'

соотношением: $c_a = c_r = \frac{d}{z} - \theta'$. Полученные значения приведены в табл. 3. Значения показателя c_a должны соответствовать показателю, определяемому в

Таблица 3: 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)

рамках метода коротковременной динамики при исследовании автокорреляционной функции. Так, в работе [13] для "чистой" трехмерной модели Изинга было получено значение $c_a = 1.362(19)$, которое демонстрирует хорошее соответствие с полученными значениями в данной главе.

Итоговые значения критических показателей 4 приводят к значению $c_a = 1.242$ для слабо неупорядоченной системы и значению $c_a = 0.936$ для сильно неупорядоченной системы, и согласуются в пределах погрешности со значениями, вычисленными при анализе эффектов старения в данных системах.

Для определения ФДО в численном исследовании существуют два способа. Первый из них заключается во "включении" малого случайного бимодального внешнего поля в момент t_w . В процессе моделирования, с момента времени t_w на решетке для каждого узла i , содержащего спин, задается поле $h_i = \pm h$. Оно должно удовлетворять двум соотношениям: среднее по всем узлам решетки равно 0 ($\langle h_i \rangle = 0$), а отклик системы на внешнее возмущение должен быть линеен, то есть величина $h \ll 1$. При исследовании данным способом функция отклика не может быть непосредственно вычислена. Более подходящей величиной для расчёта оказывается обобщенная восприимчивость $\chi(t, t_w)$.

$$\chi(t, t_w) = \int_{t_w}^t dt' R(t, t'). \quad (22)$$

В долговременном пределе $\chi(C) = \frac{1}{T} \int_C^1 X(q) dq$ и ФДО может быть вычислено через предел

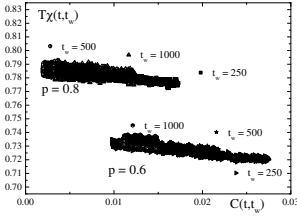
$$X(t, t_w) = - \lim_{C \rightarrow 0} \frac{\partial(T\chi(t, t_w))}{\partial C(t, t_w)}. \quad (23)$$

В диссертации для реализации данного способа при моделировании эволюции системы в момент t_w к гамильтониану добавлялось возмущение $\Delta H = - \sum_i h_i S_i$. Было использовано значение поля $h = 0.02$. Обобщенная восприимчивость рассчитывалась по формуле

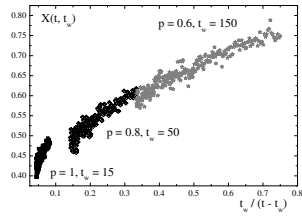
$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{L^3 h^2} \sum_i \overline{\langle h_i(t_w) S_i(t) \rangle}, \quad (24)$$

где горизонтальная черта означает усреднение по реализациям случайного внешнего поля. Моделирование проводилось посредством применения алгоритма Метрополиса.

Другим способом расчета ФДО является непосредственное использование соотношения (16) при вычислении функции отклика $R(t, t_w)$ по формуле (20) с



а)



б)

Рис. 9: а) Зависимость $T\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$; б) Зависимость $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$, полученная при реализации динамики тепловой бани.

помощью динамики тепловой бани и производной автокорреляционной функции в виде

$$\frac{\partial}{\partial t_w} C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\langle \sigma_i(t) \left[\sigma_i(t_w + 1) - \sigma_i(t_w) \right] \right\rangle.$$

В результате, флуктуационно-диссипативное отношение характеризуется выражением

$$X(t, t_w) = \frac{\sum_{i=1}^N \left\langle \sigma_i(t) \left[\sigma_i(t_w + 1) - \sigma_i^W(t_w + 1) \right] \right\rangle}{\sum_{i=1}^N \left\langle \sigma_i(t) \left[\sigma_i(t_w + 1) - \sigma_i(t_w) \right] \right\rangle}, \quad (25)$$

которое вычислялось путем реализации динамики тепловой бани. На основе определенных двухвременных зависимостей $X(t, t_w)$ с помощью процедуры экстраполяции вычислялись значения $\lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w)$ для различных времен ожидания, а затем осуществлялась экстраполяция $t_w \rightarrow \infty$ для получения асимптотического значения X^∞ .

На рис. 9 приведены полученные зависимости обобщенной восприимчивости $\chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$ (а) и зависимость $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$ (б). В табл. 4 представлены полученные предельные значения ФДО X^∞ . Они подтверждают нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга, как в случае "чистых так и для структурно неупорядоченных систем. Проведенные расчеты для различных спиновых концентраций показывают, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению асимптотического значения X^∞ .

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

Основные результаты и выводы.

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

Таблица 4: Итоговые значения. (МК) - исследования методом Монте-Карло, (ТПМ) - теоретико-полевые методы, (ЭКСП) - экспериментальные данные. ^a - моделирование во внешнем поле, ^b - метод с использованием динамики тепловой бани.

p	θ'	z	β	ν	β/ν	$c_a = \frac{d}{z} - \theta'$	X^∞
$p = 0.95, m_0 = 1$		2.185(25)	0.356(11)	0.668(14)	0.533(13)		
$p = 0.8, m_0 = 1$		2.208(32)	0.348(11)	0.685(21)	0.508(17)		
$p = 0.8, m_0 \ll 1$	0.127(16)	2.191(21)			0.504(14)	1.242	
$p = 0.6, m_0 = 1$		2.560(41)	0.354(30)	0.707(46)	0.501(32)		
$p = 0.5, m_0 = 1$		2.655(55)	0.314(28)	0.711(47)	0.442(30)		
$p = 0.6, m_0 \ll 1$	0.194(41)	2.627(41)			0.479(58)	0.948	
$p = 0.5, m_0 \ll 1$	0.192(26)	2.647(49)			0.430(53)	0.941	
Результаты диссертации. Исследование эффектов старения							
$p = 1$						1.333(40)	$0.391(12)^a$ $0.381(16)^b$
$p = 0.8$						1.237(22)	$0.418(11)^a$ $0.413(10)^b$
$- p = 0.6$						0.982(30)	$0.443(10)^a$ $0.446(10)^b$
Результаты других работ							
$p = 1$ [13] (МК)	0.108(2)	2.041(18)	0.3273(17)	0.6327(20)	0.517(2)	1.358(19)	
$p = 0.8$ [16] (МК)				0.682(2)	0.505(2)		
$p = 0.6$ [16] (МК)				0.717(6)	0.437(21)		
$p = 0.8 - 0.49$ [17] (МК)	$0.10(2),$ $m_0 = 0.01$						
$p = 0.8$ [18] (МК)		2.35(2)					
$p = 0.6$ [19] (МК)			0.349(4)	0.725(6)			
Однородная система							
[10] (ТПМ)							0.429(6)
Слабо неупорядоченная система							
[11] (ТПМ)							0.416
Слабо неупорядоченная система							
[20] (ТПМ)			0.349(5)	0.678(10)	0.515(15)		
Слабо неупорядоченная система							
[4] (ТПО)		2.1792(13)					
$FepZn_{1-p}F_2$ $p = 0.9$ (ЭКСП)		2.18(10)					

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 θ' 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 ренорм-группового описания, результатами моделирования другими методами, а также согласуются с результатами экспериментальных исследований слабо неупорядоченных изинговских магнетиков.
5. Осуществлено численное 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. По-

казано, 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 . Продemonстрировано 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 трёхмерной 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.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах

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 - 81 - 011130.
2. Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А. Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения 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.
4. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A. Ageing properties in off-equilibrium critical relaxation of 3D diluted Ising ferromagnets // XXV IUPAP Conference on Computational Physics - 2013 - abstracts.
5. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А. Компьютерное моделирование эффектов старения в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченных изингоподобных магнетиков // Труды 55 научной конференции МФТИ. Общая и прикладная физика. М.: МФТИ - 2012 - с. 147.
6. Прудников В.В., Прудников П.В., Рычков М.В., Шляхтин А.О., Поспелов Е.А. Исследование критической эволюции структурно неупорядоченной модели Изинга // Вестник Омского университета - 2008 - вып. 4 - с. 35-39.
7. Прудников П.В., Поспелов Е.А. Численное исследование неравновесной критической динамики неупорядоченной модели Изинга методом коротковременной динамики // XI Всероссийская молодёжная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния: Тезисы докладов - 2010 - Екатеринбург: Институт физики металлов УрО РАН.

8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. 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 2012 - Омск: Изд-во Ом. гос. ун-та - с. 161-164.

Список литературы

- [1] Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. // УФН. - 2003. - Т. 173. - Вып. 2. - С. 175-200.
- [2] G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi and J. J. Ruiz-Lorenzo // Phys. Rev. E. - 1999. - 5198.
- [3] M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari // J. Stat. Mech.: Theory Exp. - 2007. - P11009.
- [4] Krinitsyn A. S., Prudnikov V. V., Prudnikov P. V. // Teoret. Mat. Fiz. - 2006. - Т. 147. - 137.
- [5] Вакилов А.Н., Прудников В.В. // Письма в ЖЭТФ. - 1992. - Т. 55., вып. 12. - с.709-712.
- [6] Вакилов А.Н., Прудников В.В. // ЖЭТФ. - 1993. - Т. 103., вып. 3. - с.962.
- [7] N. Afzal, M. Pleimling // Phys. Rev. E. - 2013. - V. 87. - 012114.
- [8] Calabrese P., Gambassi A. // J. Phys. A. - 2005. - V. 38. - R133.
- [9] Abriet S., Karevski D. // European Physical Journal B. - 2004. - V. 41. - 79.
- [10] Calabrese P., Gambassi A. // Phys. Rev. E. - 2002. - V. 66. - 066101.
- [11] Calabrese P., Gambassi A. // Phys. Rev. B. - 2002. - V. 66. - 212407.
- [12] Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н., Криницын А.С. // ЖЭТФ. - 2007. - Т. 132. - вып. 2. - С. 417.
- [13] Jaster A., Mainville J., Shulke L., Zheng B. // Phys. Rev. A. - 1999. - V. 32. - 1395.
- [14] Henkel M., Pleimling M. Non-equilibrium Phase Transitions. Volume 2: Ageing and Dynamical Scaling Far from Equilibrium. Heidelberg, Springer, 2010.
- [15] Chatelain C. // J. Phys. A. - 2003. - V. 36 - 10739.
- [16] Wiseman S., Domany E. // Phys. Rev. Lett. - 1998. - V. 81 - 22.
- [17] Schehr G., Paul R. // J. Phys: Conf. Ser. - 2006. - V. 40. - 27.
- [18] Hasenbusch M., Pelissetto A., Vicari E. // J. Stat. Mech.: Theory Exp. - 2007. - P11009.
- [19] Муртазаев А. К., Камылов И. К., Бабаев А. Б. // ЖЭТФ. - 2004. - Т. 126. - вып. 6. - С. 1377-1383.
- [20] Pelissetto A., Vicari E. // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62. - P6393..
- [21] Rosov N., Hohenemser C., Eibschutz M. // Phys. Rev. B. - 1992 - V. 46. - 3452.