

ИССЛЕДОВАНИЕ МАРГИНАЛЬНОГО ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

B. B. Прудников^{a*}, П. В. Прудников^a, П. Н. Маляренко^{a,b}, Л. Н. Щур^b

^a Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского
644077, Омск, Россия

^b Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 1 августа 2019 г.,
после переработки 1 августа 2019 г.
Принята к публикации 12 августа 2019 г.

Осуществлено численное исследование методами Монте-Карло влияния различных начальных значений намагниченности m_0 и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга. На основе анализа временной зависимости намагниченности, двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости выявлено проявление логарифмических поправок и кроссоверных явлений переколяционного поведения на неравновесные характеристики и критические индексы. Проведено исследование нарушений флюктуационно-диссипативной теоремы и вычислены значения предельного флюктуационно-диссипативного отношения для случая высокотемпературного начального состояния. Проведено исследование влияния различных начальных состояний на значения предельного флюктуационно-диссипативного отношения. Показано, что неравновесная критическая динамика слабонеупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p \geq 0.9$ относится к классу универсальности неравновесного критического поведения чистой модели и характеризуется одинаковыми критическими показателями и значениями предельного флюктуационно-диссипативного отношения, а неравновесное критическое поведение систем с $p \leq 0.85$ демонстрирует зависимость универсальных характеристик неравновесного критического поведения от концентрации дефектов и нарушение динамического скейлинга, связанных с влиянием кроссоверных эффектов переколяционного поведения.

DOI: 10.31857/S0044451020020108

1. ВВЕДЕНИЕ

Разбиение систем, демонстрирующих фазовые переходы второго рода, на классы универсальности равновесного [1] и динамического [2] критического поведения позволило придать теории фазовых переходов и критических явлений необычную стойкость. Изучение критического поведения структурно неупорядоченных магнитных систем со случайно распределенными немагнитными атомами премеси позволило расширить представление о факторах, влияющих на систематизацию по классам универсальности [3]. Исследования показали [4], что присутствие точечных замороженных дефектов структуры изменяет критическое поведение тех систем,

для которых выполняется следующий критерий: $2 - d\nu = \alpha > 0$, где d — пространственная размерность системы, ν — критический индекс корреляционной длины и α — критический индекс теплоемкости для чистой системы. Критерий влияния точечных замороженных дефектов структуры на критическое поведение выполняется только для систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, что нашло подтверждение в результатах как экспериментальных, так и теоретических ренормгрупповых и численных исследований Монте-Карло [5–10]. Случай систем, критическое поведение которых описывается двумерной моделью Изинга, является маргинальным, так как критические индексы чистой модели $\nu = 1$, $\alpha = 0$. Теория критических явлений предсказывает для маргинальных случаев появление логарифмических поправок в асимптотическом поведении термодинамических и корреляцион-

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

ных функций при сохранении значений критических индексов чистой модели. В работе [11] для слабо-неупорядоченной двумерной модели Изинга со случайными связями было аналитически показано, что теплопроводность и корреляционная длина вблизи критической точки характеризуются следующими зависимостями:

$$\xi \propto |\tau|^{-1} [1+g \ln(1/|\tau|)]^{1/2}, \quad C_V \propto \ln |\ln |\tau|| \quad (1)$$

с $g = 4.8(1-p)/p$, где $\tau = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура, а параметр p определяет спиновую концентрацию системы. В работах [12, 13] для той же модели предсказывалось появление степенных логарифмических поправок в температурном поведении магнитной восприимчивости

$$\chi \propto |\tau|^{-7/4} \ln^{7/8} |\tau|. \quad (2)$$

Данные предсказания получили подтверждение в работах [14–17] при численных исследованиях методами Монте-Карло.

Данная статья посвящена изучению критического поведения двумерной модели Изинга с замороженными дефектами структуры, для которой фазовая диаграмма содержит два устойчивых фокуса притяжения фазовых потоков: фиксированную точку чистой модели Изинга и фиксированную точку спиновой переколонии при спиновой концентрации $p_c^{(s)} = 0.5927$. Эта модель исследовалась численно в ряде работ [18–22]. Некоторые из авторов работ [18, 19] утверждают, что статические критические индексы β , γ , ν изменяются с изменением концентрации дефектов, но при этом отношения β/ν , γ/ν остаются неизменными. Другие авторы [20–22] делают заключение, что влияние дефектов для слабо-неупорядоченных систем приводит только к логарифмическим поправкам у характеристик критического поведения термодинамических и корреляционных функций чистой модели, в то время как в области сильной неупорядоченности происходит усиление влияния логарифмической поправки в корреляционной длине

$$\xi \propto |\tau|^{-1} \ln^{1/2} |\tau|, \quad (3)$$

и в других функциях, определяемых в критической области их связью с корреляционной длиной, а именно:

$$\chi \propto \xi^{7/4}, \quad M \propto \xi^{-1/8}. \quad (4)$$

В то же время, в работах [23, 24] при исследовании критической динамики модели было выявлено, что вблизи порога спиновой переколонии (для систем

со спиновой концентрацией $p \leq 0.85$) динамический критический индекс z , определяющий температурную зависимость времени релаксации, демонстрирует зависимость от концентрации дефектов с нарушением стандартной формы динамического скейлинга в виде $z = A |\ln(p - p_c)| + B$. В связи с этим, ожидается весьма нетривиальным влияние дефектов на характеристики неравновесного поведения двумерной модели Изинга.

В настоящее время поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой, вызывает большой интерес исследователей. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения и нарушениями флюктуационно-диссипативной теоремы [25]. Хорошо известными примерами подобных систем с медленной динамикой и эффектами старения являются такие сложные системы, как спиновые стекла [26]. Однако данные особенности неравновесного поведения наблюдаются и в системах, испытывающих фазовые переходы второго рода [27, 28], так как критическая динамика таких систем характеризуется аномально большими временами релаксации.

Для описания неравновесных критических явлений наряду с аналитическими подходами широко применяются численные методы, в частности, методы статистического моделирования Монте-Карло [28]. В данной работе планируется методами Монте-Карло исследовать эффекты старения и нарушения флюктуационно-диссипативной теоремы для чистой и структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга с эволюцией из различных начальных состояний. Ставится цель выявить особенности влияния дефектов в широкой области изменения их концентраций на неравновесную критическую динамику данной модели с выделением ее маргинальных критических свойств. Отметим, что исследования неравновесной критической динамики методами Монте-Карло имеют целый ряд преимуществ по сравнению со случаем их применения к описанию равновесного критического поведения, так как временные характеристики дают гораздо более широкую базу данных для анализа асимптотических свойств критического поведения, чем зависимость характеристик от температуры или линейного размера систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДЫ

Гамильтониан ферромагнитной модели Изинга, разбавленной немагнитными атомами примеси, с

учетом влияния внешнего магнитного поля h задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j - h \sum_i p_i S_i, \quad (5)$$

где $J > 0$ характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами $S_i = \pm 1$, зафиксированными в узлах плоской квадратной решетки. Числа заполнения p_i вводятся как случайные числа, принимающие значения нуль или единица: p_i принимается равным единице, если в узле i находится спин, и нуль в случае его отсутствия (магнитный атом замещен немагнитным атомом примеси). Дефекты структуры распределялись в системе каноническим образом в соответствии с функцией распределения $P(p_i) = (1-p)\delta(p_i) + p\delta(p_i)$, где $p = \langle p_i \rangle$ задает величину спиновой концентрации в системе. Положение дефектов структуры фиксировалось для отдельной примесной конфигурации.

В качестве характеристик неравновесного процесса выступают такие величины, как намагниченность

$$\begin{aligned} M(t) &= \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) \rangle] = \\ &= \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) \right\rangle \right] \quad (6) \end{aligned}$$

($N_s = pL^2$ характеризует число спинов в решетке), двухвременная корреляционная функция $C(t, t_w)$ и линейная функция отклика $R(t, t_w)$ на малое внешнее поле, примененное в момент времени t_w , которые могут быть определены соотношениями

$$\begin{aligned} C_{con}(t, t_w) &= \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle \right] - \\ &- \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) \right\rangle \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t_w) \right\rangle \right], \quad (7) \end{aligned}$$

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta[\langle S(x, t) \rangle]}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0}, \quad (8)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные — усреднение по различным конфигурациям распределения дефектов в решетке.

Однако линейная функция отклика $R(t, t_w)$, соответствующая определению (8), не может быть непосредственно измерена экспериментально или получена методами компьютерного моделирования. В данной работе, по аналогии с работами [29–32],

была использована методика, позволяющая рассчитать функцию отклика без применения внешнего магнитного поля. Расчет обобщенной восприимчивости осуществлялся в виде интегральной функции отклика (термостатической восприимчивости):

$$\begin{aligned} \chi(t, t_w) &= \int_0^{t_w} dt' R(t, t') = \\ &= \frac{1}{T_c N} \sum_i [\langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \rangle], \quad (9) \end{aligned}$$

где функция отклика $R(t, t_w)$ задается соотношением (8), а функция $\Delta S_i(t_w)$ в (9) рассчитывается при моделировании состояний системы от начального момента времени $t = 0$ до времени ожидания t_w и определяется соотношением

$$\Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)], \quad (10)$$

где

$$S_i^W(s) = \text{th} \left(J \sum_{j \neq i} p_j S_j / T \right).$$

Для расчета характеристик неравновесного критического поведения было осуществлено компьютерное моделирование динамического процесса односпиновых переворотов в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс односпиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани [33], задающего вероятность перехода спина системы в новое состояние $S_i \rightarrow S'_i$ посредством формулы

$$W_{sp}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp[-H(S'_i)/T]}{\sum_{S_j} \exp[-H(S_j)/T]}, \quad (11)$$

где суммирование по S_j в знаменателе проводится по всем возможным состояниям спина S_i до переворота. Для модели Изинга с двумя возможными состояниями $S_j = \pm 1$ указанную вероятность переворота можно записать в виде

$$W_{sp} = \frac{\exp(-H(S'_i)/T)}{\exp(H(S_i)/T) + \exp(-H(S_i)/T)} \quad (12)$$

с реализацией так называемой глауберовской динамики. В качестве единицы времени динамического процесса выбирается шаг Монте-Карло на спин (MCS/s), который определяет N_s последовательных переворотов спинов в узлах решетки.

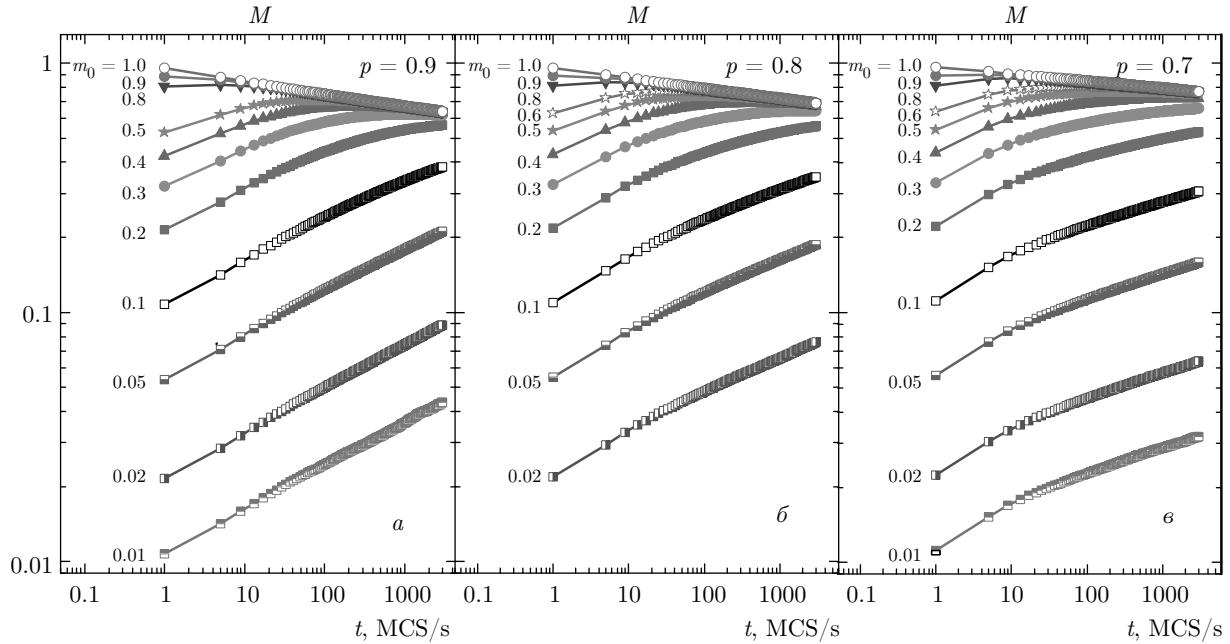


Рис. 1. Графики критической релаксации намагниченности $M(t)$ для структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга с разными спиновыми концентрациями p с различными значениями начальной намагниченности m_0

Моделирование проводилось на квадратной решетке с линейным размером $L = 1024$ в широком интервале изменения спиновых концентраций с $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.85, 0.8, 0.75, 0.7$ при соответствующих критических температурах $T_c(p)$: $T_c(1.0) = 2.26918$, $T_c(0.95) = 2.08989(8)$, $T_c(0.9) = 1.9032(5)$, $T_c(0.85) = 1.7098(4)$, $T_c(0.8) = 1.5103(4)$, $T_c(0.75) = 1.2980(10)$, $T_c(0.7) = 1.0729(10)$ [22, 34].

Системе задавался старт из различных начальных состояний со значениями намагниченности в интервале от $m_0 = 0.01$ до $m_0 = 1$. Поведение систем исследовалось на временах до 10000 шагов Монте-Карло на спин. При моделировании чистой системы с $p = 1.0$ проводилось статистическое усреднение по 15000 прогонок. При моделировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 2000 примесным конфигурациям и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ

Неравновесное поведение намагниченности, релаксирующую из начального состояния с намагни-

ченностью m_0 , характеризуется в критической точке следующей скейлинговой зависимостью [28, 35] —

$$M(t, t_m) = A_m t^{-\beta/z\nu} F_m(t/t_m), \quad (13)$$

— с временным масштабом $t_m = B_m m_0^{-k}$, где показатель $k = 1/(\theta' + \beta/(z\nu)) > 0$ и скейлинговая функция $F_m(t/t_m) = F_m(tm_0^k)$. Временная зависимость намагниченности $M(t, t_m)$ на этапе неравновесной эволюции систем с $m_0 \ll 1$ (высокотемпературное начальное состояние) определяется характерным ростом, описываемым степенным законом $M(t) \approx m_0 t^{\theta'}$, где θ' — показатель начальной эволюции системы, в то время как для начально-го низкотемпературного полностью упорядоченного состояния с $m_0 = 1$ убывающей степенной зависимостью $M(t) \propto t^{-\beta/z\nu}$. Результаты моделирования неравновесного критического поведения намагниченности для различных начальных состояний представлены на рис. 1 для спиновых концентраций $p = 0.9$, $p = 0.8$ и $p = 0.7$. Графики $M(t)$ наглядно демонстрируют существенные качественные и количественные различия в релаксации намагниченности из высокотемпературного начально-го состояния с $m_0 \ll 1$, низкотемпературного полностью упорядоченного состояния с $m_0 = 1$ и промежуточных состояний с начальной намагниченностью $0.1 \leq m_0 \leq 0.9$. Видно, что кривые релаксации для систем, стартовавших из начальных состояний

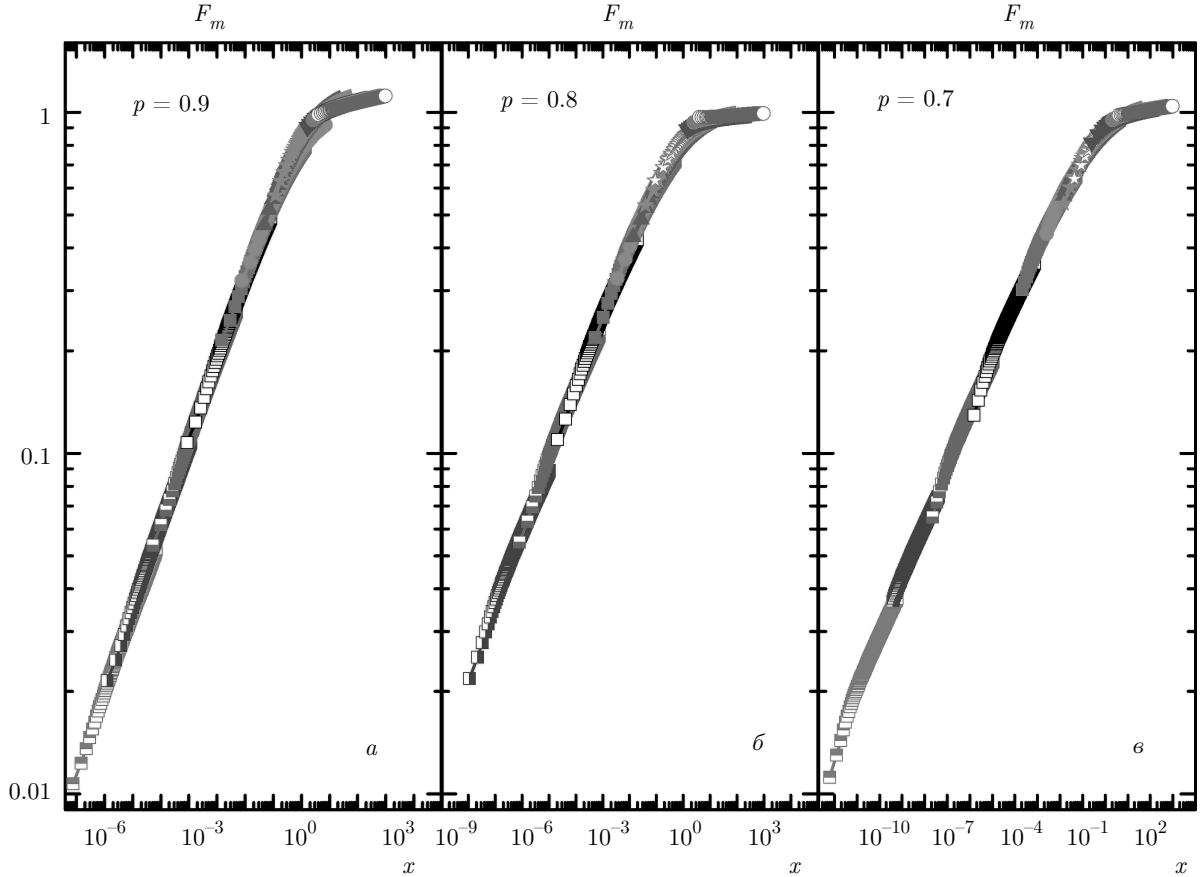


Рис. 2. Зависимость скейлинговой функции $F_m(tm_0^k) = t^{\beta/z\nu} M(t)$ от переменной $x = tm_0^k$ для систем с разными спиновыми концентрациями p

$m_0 \neq 1$, асимптотически стремятся к кривой релаксации из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$. В этом случае для систем с $m_0 \ll \ll 1$ характеристическое увеличение намагниченности, описываемое степенной зависимостью $M(t) \approx \approx m_0 t^{\theta'}$ с $\theta' = 0.190(3)$ для $p = 0.9$, $\theta' = 0.166(2)$ для $p = 0.8$ и $\theta' = 0.128(3)$ для $p = 0.7$, на временах $t > t_{cr} = t_m \sim m_0^{-k}$ меняется убывающей степенной зависимостью $M(t) \propto t^{-\beta/z\nu}$. При эволюции системы из начального низкотемпературного состояния с $m_0 = 1$ временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определяется степенной зависимостью $M(t) \propto t^{-\beta/z\nu}$ со значениями показателей, зависящими от спиновой концентрации p .

На рис. 2 представлены результаты численной проверки предсказания временной скейлинговой зависимости (13) для намагниченности $M(t, t_m)$ как функции на начальных значений намагниченности m_0 для систем с $p = 0.9$, $p = 0.8$ и $p = 0.7$. Для скейлинговой функции $F_m(x)$ от $x = tm_0^k$ наблюдается «коллапс» данных, полученных для различных

m_0 , на единой универсальной кривой с линейным начальным участком (в двойном логарифмическом масштабе) с $F_m(x) \propto x^{1/k}$. Были получены следующие значения показателя $1/k$ для двумерной модели Изинга: $1/k = 0.248(3)$ для $p = 0.9$, $1/k = 0.216(2)$ для $p = 0.8$ и $1/k = 0.167(2)$ для $p = 0.7$.

Учитем во временной зависимости намагниченности структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга, релаксирующей из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$, влияние логарифмических поправок в следующей форме:

$$M(t) \propto t^{-\beta/z\nu} \left(1 + \frac{g}{z\nu} \ln t\right)^{-\beta/2\nu}, \quad (14)$$

где [11, 22]

$$g = \frac{4}{\pi} g_0 = \frac{4}{\pi} \frac{8}{(1 + \sqrt{2}/\pi)^2} \frac{1-p}{p}.$$

В долговременном режиме на временах $t \gg t_w \gg 1$, а также для систем с более высокими концентрациями дефектов влияние дефектов может харак-

теризоваться логарифмической поправкой следующего вида:

$$M(t) \propto t^{-\beta/z\nu} (\ln t)^{-\beta/2\nu}. \quad (15)$$

В данных выражениях для намагниченности отношение статических индексов β/ν можно считать не зависящим от концентрации дефектов и положить равным значению $\beta/\nu = 1/8$ для чистой модели.

Представленные на рис. 3а временные зависимости намагниченности $M(t)$ при релаксации из начального состояния с $m_0 = 1$ для систем с различными спиновыми концентрациями p демонстрируют сильную зависимость от концентрации дефектов. Если пренебречь влиянием логарифмических поправок и рассматривать временное изменение намагниченности как $M(t) \propto t^{-\beta/z'\nu}$, то получаемые эффективные значения динамического критического индекса $z'(p)$ таковы: $z'(1.0) = 2.161(11)$, $z'(0.95) = 2.240(12)$, $z'(0.9) = 2.646(13)$, $z'(0.85) = 2.741(15)$, $z'(0.8) = 3.085(19)$, $z'(0.75) = 3.495(26)$, $z'(0.7) = 4.004(35)$. Отметим, что значение индекса z' для чистой модели хорошо согласуется со значением $z(1.0) = 2.1665(12)$, определенным в работе [36].

Проведенный на рис. 3б учет влияния логарифмических поправок вида (14) на временное поведение намагниченности, представленное в виде

$$M(t)(1 + (g/z\nu) \ln t)^{\beta/2\nu} \propto t^{-\beta/z\nu},$$

приводит к заметно другим значениям $z(p)$: $z(0.95) = 2.161(12)$, $z(0.9) = 2.424(15)$, $z(0.85) = 2.491(16)$, $z(0.8) = 2.724(18)$, $z(0.75) = 2.992(23)$, $z(0.7) = 3.462(26)$. Учет влияния логарифмических поправок вида (15), представленный как

$$M(t)(\ln t)^{\beta/2\nu} \propto t^{-\beta/z\nu}$$

на рис. 3в, приводит к следующим значениям $z(p)$: $z(0.95) = 1.912(11)$, $z(0.9) = 2.158(13)$, $z(0.85) = 2.293(15)$, $z(0.8) = 2.508(17)$, $z(0.75) = 2.774(21)$, $z(0.7) = 3.217(25)$.

Анализ полученных значений динамического критического индекса $z(p)$ с учетом логарифмических поправок к степенной зависимости намагниченности приводит к пониманию, что логарифмические поправки вида (14) надо учитывать для слабонеупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p > 0.9$, в то время как для систем с $p \leq 0.9$ надо учитывать логарифмические поправки вида (15). В результате мы выделяем следующие значения динамического критического индекса $z(p)$: $z(0.95) = 2.161(12)$, $z(0.9) = 2.158(13)$,

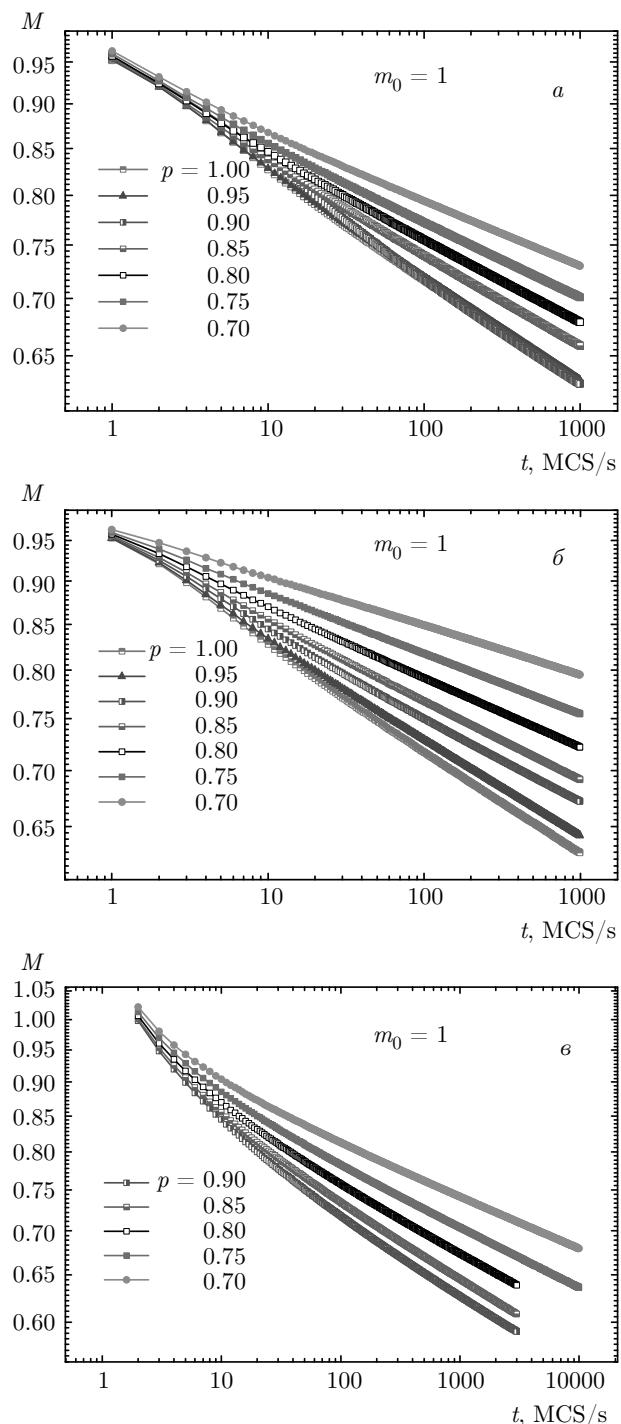


Рис. 3. Временная зависимость намагниченности $M(t)$ при релаксации из начального состояния с $m_0 = 1$ для систем с различными спиновыми концентрациями p (а) и с учетом влияния логарифмических поправок в виде $M(t)(1 + (g/z\nu) \ln t)^{\beta/2\nu}$ (б) и $M(t)(\ln t)^{\beta/2\nu}$ (в)

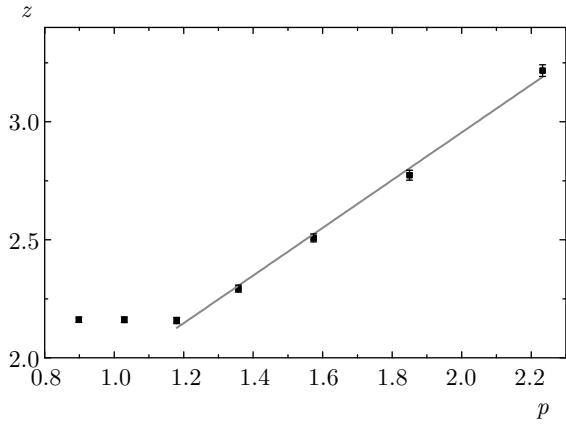


Рис. 4. Зависимость динамического критического индекса $z(p)$ от спиновой концентрации в логарифмическом масштабе $|\ln(p - p_c)|$

$z(0.85) = 2.293(15)$, $z(0.8) = 2.508(17)$, $z(0.75) = 2.774(21)$, $z(0.7) = 3.217(25)$. Видно, что значения показателей $z(p)$ для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.9$ в пределах погрешности совпадают со значением $z = 2.161(11)$ для чистой системы. Данный результат подтверждает, что значения динамического критического индекса $z(p)$ для слабонеупорядоченных систем с $p \geq 0.9$ остаются постоянными и их критическая динамика принадлежит к классу универсальности чистой двумерной модели Изинга [23, 24]. В то же время для спиновых концентраций $p < 0.85$ зависимость $z(p)$, как видно из рис. 4, хорошо описывается логарифмической зависимостью

$$z(p) = A |\ln(p - p_c)| + B,$$

характеризуемой нарушением стандартной формы динамического скейлинга из-за влияния кроссоверных эффектов переколяционного поведения [23, 24].

Учет влияния логарифмических поправок вида (14) и (15) на временное поведение намагниченности при эволюции из высокотемпературного начального состояния с $t_0 \ll 1$ приводит также к логарифмической зависимости от спиновой концентрации показателя начальной эволюции намагниченности

$$\theta'(p) = A' |\ln(p - p_c)| + B'$$

с величиной $A' < 0$, представленной на рис. 5a.

Применение логарифмических поправок вида (14) и (15) к временному поведению намагниченности при эволюции системы из различных начальных состояний, характеризуемой выражением (13), при учете влияния логарифмических поправок на зна-

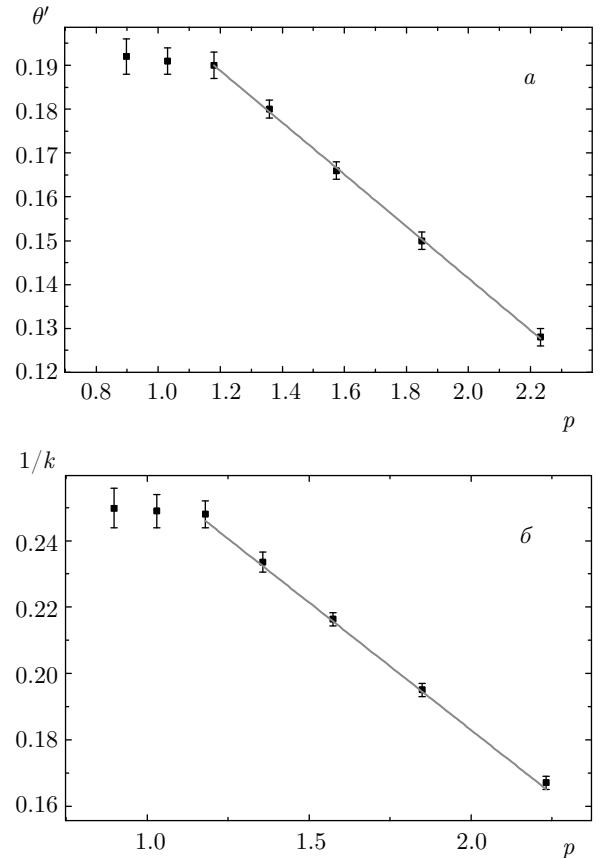


Рис. 5. Зависимость динамического критического показателя начальной эволюции $\theta'(p)$ (a) и показателя $1/k(p)$ для скейлинговой функции $F_m(tm_0^k)$ (б) от спиновой концентрации p в логарифмическом масштабе $|\ln(p - p_c)|$

чения $z(p)$ приводит к модификации скейлинговой функции

$$F_m(t/t_m) = F_m(tm_0^k),$$

а следовательно, к изменению значений показателя k . Проведенный анализ показал, что зависимость показателя $1/k$ от спиновой концентрации также описывается логарифмической зависимостью

$$1/k(p) = A'' |\ln(p - p_c)| + B''$$

с $A'' < 0$, представленной на рис. 5б.

4. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИЛЬНОНЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Известно, что в термодинамическом пределе при концентрации спинов в системе $p > p_c$ существует только один переколяционный кластер, состоящий из бесконечного числа узлов. Все остальные кластеры являются конечными и не вносят вклад в сред-

ние значения термодинамических величин. В случае $p < p_c$ в системе нет переколяционного кластера и, следовательно, отсутствуют вклады в термодинамические величины. Однако в системах конечных размеров малые кластеры могут вносить случайный шум в значения вычисляемых величин, увеличивая погрешность их вычислений. Для сильнонеупорядоченных систем со спиновыми концентрациями, близкими к порогу спиновой переколяции, это влияние усиливается. Таким образом, при моделировании сильнонеупорядоченных систем можно увеличить точность вычислений, если рассматривать для каждой примесной конфигурации только спины, принадлежащие переколяционному кластеру.

Мы провели исследование влияния непереколяционных кластеров спинов на временное поведение намагниченности системы со спиновой концентрацией $p = 0.7$. Для идентификации кластеров был применен алгоритм Хошена–Копельмана [37, 38]. После выращивания примесной конфигурации каждому узлу решетки, занятому спином, ставится в соответствие номер кластера, которому этот узел принадлежит. Среди всех кластеров системы выбирается переколяционный кластер, спины которого учитываются в процессе моделирования системы. Число таких спинов для разных примесных конфигураций может быть различным. С учетом этого, в выражениях (6), (7) усреднение проводится по числу спинов N_s в переколяционном кластере. Единицей измерения времени является шаг Монте-Карло на спин, который соответствует возможности переворота всех спинов переколяционного кластера.

На рис. 6 приведены графики временных зависимостей намагниченности для $m_0 = 0.01$ и $m_0 = 1$, вычисленных с учетом вкладов только спинов переколяционного кластера и при учете всех спинов системы. Из сравнения графиков видно, что для низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ влияние малых кластеров спинов более выражено по сравнению со случаем высокотемпературного начального состояния. Мы связываем данную особенность начального состояния с $m_0 = 1$ с неравновесным изменением доменной структуры системы при переходе от однодоменного состояния при $T_0 = 0$ к многодоменной флуктуационной структуре, возникающей при критической температуре T_c .

Критический индекс θ' для системы с $p = 0.7$, вычисленный при рассмотрении вклада переколяционного кластера спинов, принимает значение $\theta' = 0.131(2)$. Показатель z с учетом логарифмической поправки в виде (15) равен $z = 3.215(18)$. С учетом поправки в виде (14) и без учета поправок значения

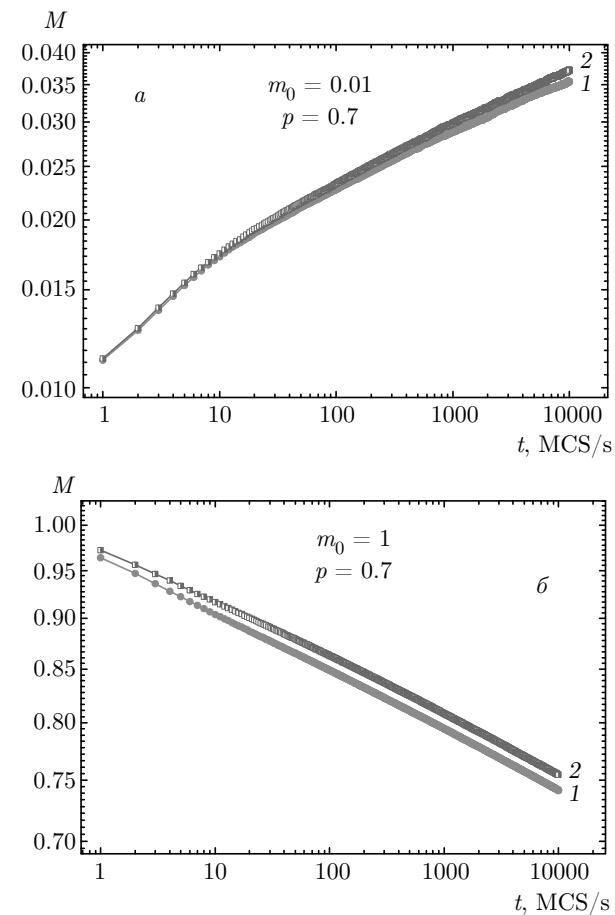


Рис. 6. Сравнение неравновесных зависимостей намагниченности $M(t)$ для $m_0 = 0.01$ (а) и $m_0 = 1$ (б) при учете всех спинов системы (1) и при учете только спинов переколяционного кластера (2)

показателя равны соответственно $z = 3.461(19)$ и $z = 4.001(29)$. Данные значения в пределах погрешности совпадают со значениями, вычисленными при учете всех спинов системы.

Таким образом, для сильнонеупорядоченных систем малые кластеры спинов действительно вносят случайный шум в характеристики системы, что увеличивает погрешность вычислений. В то же время, этот шум не оказывает существенного влияния на вычисленные значения критических показателей.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

На следующем этапе исследований был осуществлен расчет двухвременной зависимости

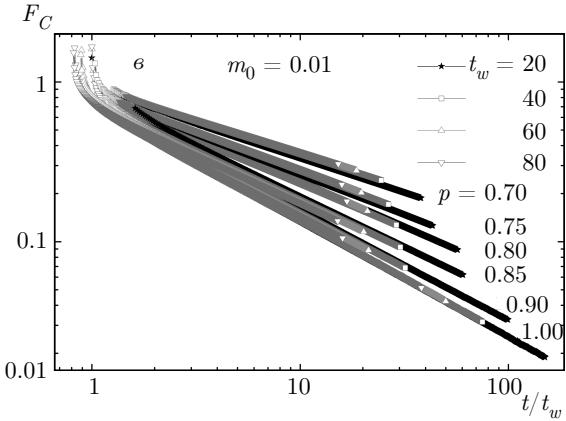
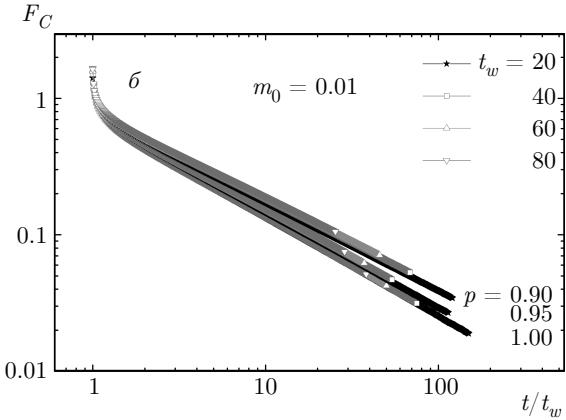
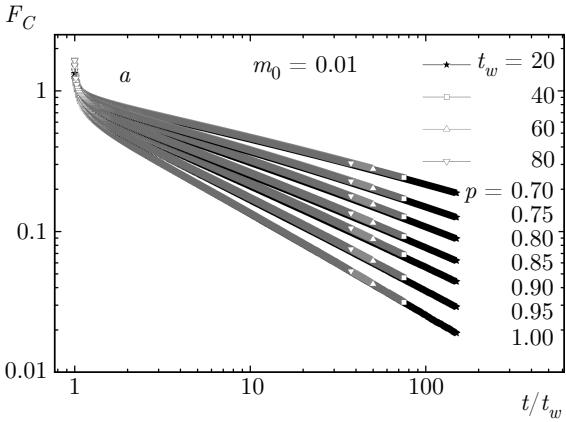


Рис. 7. Зависимости скейлинговых функций $F_C(t/t_w) = t_w^{2\beta/(z\nu)} C(t, t_w)$ от t/t_w (а) и с учетом логарифмических поправок в виде $F_C(t(1 + (g/z) \ln t)^{-z\nu/2} / (t_w(1 + (g/z) \ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для системы $p = 0.95$ (б) и в виде $F_C(t(\ln t)^{-z\nu/2} / (t_w(\ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для систем с $p \leq 0.9$ (в) при эволюции из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0.01$

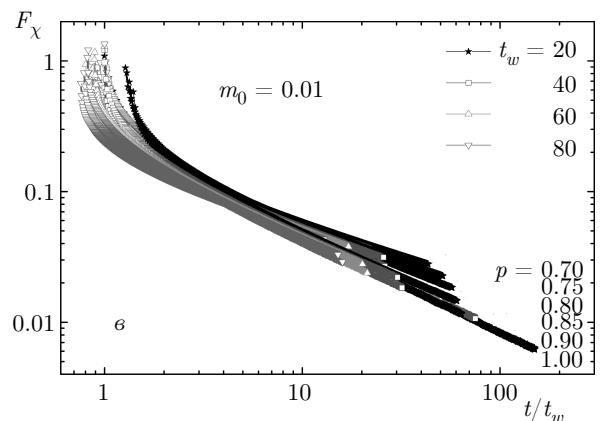
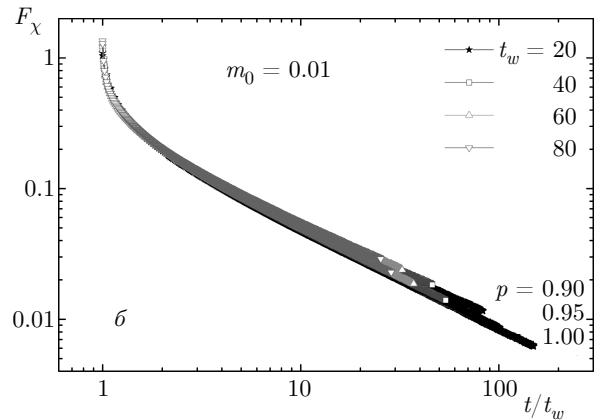
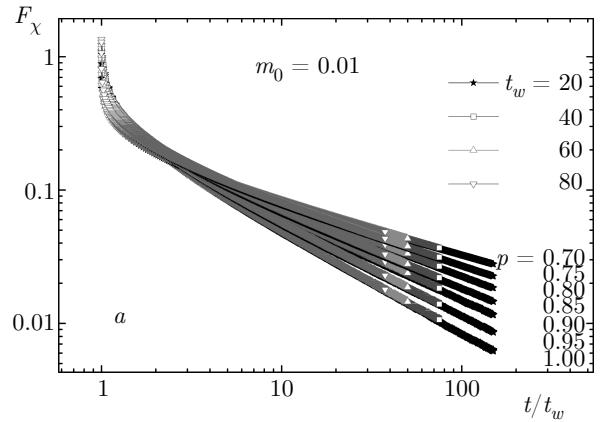


Рис. 8. Зависимости скейлинговых функций $F_\chi(t/t_w) = t_w^{2\beta/(z\nu)} \chi(t, t_w)$ от t/t_w (а) и с учетом логарифмических поправок в виде $F_\chi(t(1 + (g/z) \ln t)^{-z\nu/2} / (t_w(1 + (g/z) \ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для системы $p = 0.95$ (б) и в виде $F_\chi(t(\ln t)^{-z\nu/2} / (t_w(\ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для систем с $p \leq 0.9$ (в) при эволюции из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0.01$

автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ (рис. 7) и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ (рис. 8) как интегральной характеристики функции отклика при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью

$m_0 = 0.01 \ll 1$ и низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$. Эффекты старения проявляются на временах $t - t_w \sim t_w$ и характеризуются замедлением корреляции и релаксации системы

с увеличением ее возраста — времени ожидания t_w в соответствии с обобщенными скейлинговыми формами [28]:

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/z\nu} F_C(\xi(t)/\xi(t_w)), \\ \chi(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/z\nu} F_\chi(\xi(t)/\xi(t_w)), \end{aligned} \quad (16)$$

где $F_{C,\chi}$ — скейлинговые функции, зависящие от корреляционных длин с учетом логарифмических поправок (1) и (3) для структурно неупорядоченных систем.

Для проверки реализации соотношений (16) были построены зависимости $t_w^{2\beta/(z\nu)} C(t, t_w)$, $t_w^{2\beta/(z\nu)} \chi(t, t_w)$ от t/t_w (при пренебрежении логарифмическими поправками к корреляционным длинам в системах с дефектами), показанные на рис. 7а и рис. 8а при эволюции систем из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0.01$. Представленные графики демонстрируют коллапс полученных данных для различных t_w на универсальных кривых, определяемых скейлинговыми функциями $F_{C,\chi}$, для каждой спиновой концентрации.

На долговременном этапе эволюции с $t - t_w \gg t_w$ двухвременные зависимости скейлинговых функций $F_{C,\chi}$, согласно [28], характеризуются выражениями

$$\begin{aligned} \tilde{F}_C(t/t_w) &\propto (t/t_w)^{-c_a}, \\ \tilde{F}_\chi(t/t_w) &\propto (t/t_w)^{-c_\chi} \end{aligned} \quad (17)$$

с показателями $c_{a,\chi}$, связанными с критическими индексами z , θ' соотношениями $c_{a,\chi} = d/z - \theta'$, где $d = 2$ — пространственная размерность системы. Из асимптотического наклона изображающих кривых для скейлинговых функций $F_{C,\chi}$ на временном интервале с $t/t_w \gg 1$ были определены значения показателей $c_a = 0.729(6)$ и $c_\chi = 0.735(4)$ для чистой модели Изинга, которые совпадают в пределах погрешностей расчета друг с другом, а также со значением $c_{a,\chi} = 0.733(4)$, вычисленным на основе значений критических индексов $z = 2.161(11)$ и $\theta' = 0.192(4)$.

Для структурно неупорядоченной модели Изинга в соотношениях (16) для скейлинговых функций $F_{C,\chi}$ уже необходимо учитывать влияние логарифмических поправок к критическому поведению корреляционной длины, которые в той или иной мере должны привести к изменению показателей $c_{a,\chi}$ в (17). С учетом вида логарифмических поправок показатели $c_{a,\chi}$ будем искать из асимптотического наклона изображающих кривых для скейлинговых функций $F_{C,\chi}$ на

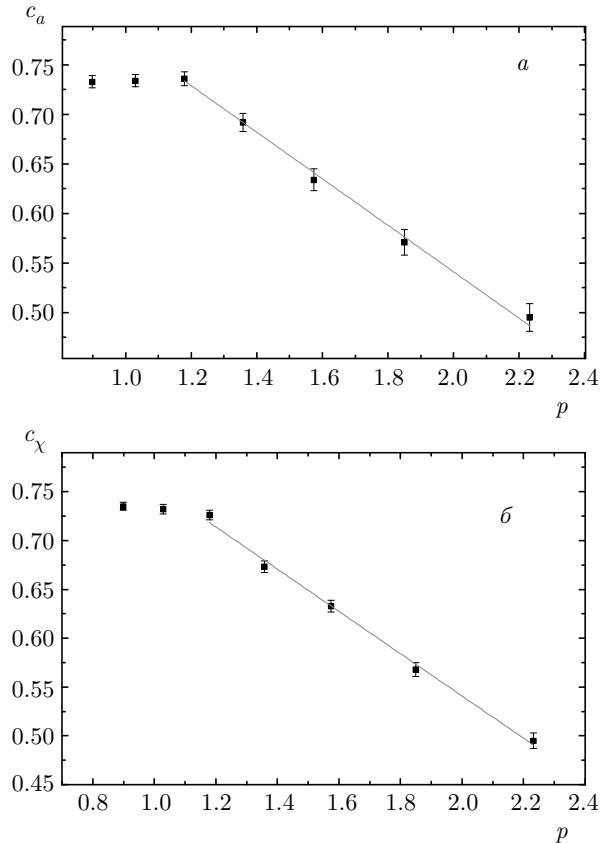


Рис. 9. Зависимости критических показателей $c_{a,\chi}(p)$ для автокорреляционной функции (а) и динамической восприимчивости (б), вычисленные с учетом логарифмических поправок от спиновой концентрации p , представленные в логарифмическом масштабе $|\ln(p - p_c)|$

временном интервале с $t/t_w \gg 1$ от переменных $t(1 + (g/z) \ln t)^{-z\nu/2}/(t_w(1 + (g/z) \ln t_w)^{-z\nu/2})$ для системы с $p = 0.95$ и от $t \ln^{-z\nu/2} t/(t_w \ln^{-z\nu/2} t_w)$ для систем с $p \leq 0.9$. В результате были определены следующие значения показателей $c_{a,\chi}$, а именно, $c_a(p)$: $c_a(0.95) = 0.726(6)$, $c_a(0.9) = 0.730(7)$, $c_a(0.85) = 0.681(9)$, $c_a(0.8) = 0.627(11)$, $c_a(0.75) = 0.557(13)$, $c_a(0.7) = 0.487(14)$; и $c_\chi(p)$: $c_\chi(0.95) = 0.732(5)$, $c_\chi(0.9) = 0.726(5)$, $c_\chi(0.85) = 0.673(6)$, $c_\chi(0.8) = 0.633(6)$, $c_\chi(0.75) = 0.568(7)$, $c_\chi(0.7) = 0.495(8)$. Сопоставление данных значений показывает их хорошее согласие друг с другом в пределах погрешности расчетов и со значениями $c_{a,\chi}(p)$, вычисленными с использованием критических показателей $z(p)$ и $\theta'(p)$, а именно, $c_a(0.95) = 0.734(4)$, $c_a(0.9) = 0.736(4)$, $c_a(0.85) = 0.692(4)$, $c_a(0.8) = 0.631(3)$, $c_a(0.75) = 0.571(3)$, $c_a(0.7) = 0.493(3)$. Анализ показывает, что значения критических показателей $c_{a,\chi}(p)$, вычисленные с учетом логарифмических поправок

для слабонеупорядоченных систем с $p \geq 0.9$, в пределах погрешности совпадают между собой и с найденными для чистой модели значениями $c_{a,\chi}(1.0) = 0.732(5)$ и в итоге критическая динамика таких систем принадлежит к классу универсальности чистой двумерной модели Изинга [23, 24]. В то же время для спиновых концентраций $p < 0.85$ зависимость $c_{a,\chi}(p)$, как видно на рис. 9, хорошо описывается логарифмической зависимостью

$$c_{a,\chi}(p) = A_{a,\chi} |\ln(p - p_c)| + B_{a,\chi},$$

отражающей влияние кроссоверных эффектов переколиционного поведения [23, 24]. Показатели $c_{a,\chi}$, вычисленные для системы с $p = 0.7$ с учетом вклада переколиционного кластера спинов, принимают значения $c_a(0.7) = 0.485(12)$ и $c_\chi(0.7) = 0.494(7)$, которые хорошо согласуются с указанными выше значениями и имеют меньшую погрешность.

6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНОГО ОТНОШЕНИЯ ДЛЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ

В данном разделе нами был проведен расчет флюктуационно-диссипативного отношения (ФДО) в соответствии с соотношением [28]

$$X(t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T_c \frac{\partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}, \quad (18)$$

с помощью которого можно определить предельное флюктуационно-диссипативное отношение $X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} X(t_w)$.

На рис. 10 представлены графики параметрических зависимостей $T_c \chi(t, t_w)$ от $C(t, t_w)$ для случая эволюции систем с различными спиновыми концентрациями p из высокотемпературного начального состояния с $t_0 = 0.01$. Для получения предельного значения ФДО была проведена процедура определения значений $X(t_w)$ на основе соотношения (18) для каждого значения времени ожидания t_w . К полученным значениям $X(t_w)$ была затем применена линейная аппроксимация и экстраполяция $X(t_w \rightarrow \infty)$, которая и позволила определить исключенные предельные значения ФДО (табл. 1). Найденное для чистой модели Изинга значение предельного ФДО $X_{HT}^\infty = 0.339(19)$ находится в очень хорошем согласии с результатом компьютерного моделирования $X_{HT}^\infty = 0.33(1)$, полученным в работе [32]. Для слабонеупорядоченных ($p = 0.95$ и $p = 0.9$) систем

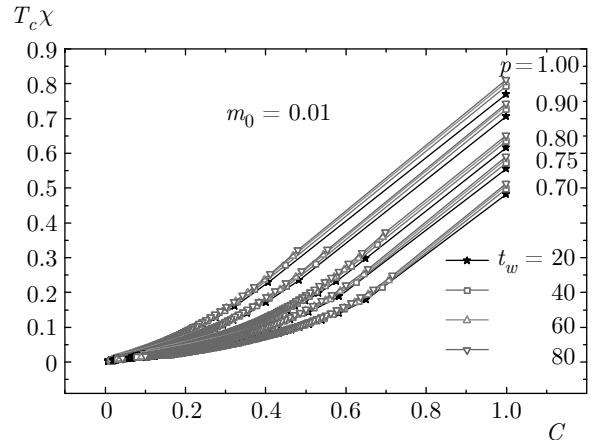


Рис. 10. Параметрическая зависимость динамической восприимчивости $T_c \chi(t, t_w)$ от автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ при эволюции систем с различными спиновыми концентрациями p из высокотемпературного начального состояния с $t_0 = 0.01$

значение предельного ФДО в пределах погрешности совпадает со значением для чистой модели, следовательно, эти системы относятся к одному классу универсальности.

Для сильнонеупорядоченных систем предельное значение ФДО начинает зависеть от концентрации дефектов, что связано с влиянием кроссоверных эффектов переколиционного поведения [23]. Расчет предельных значений ФДО для структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $t_0 = 1$ был представлен нами в работе [39], в которой были выявлены эффекты сверхстарения, приводящие к обращению значений предельного ФДО X_{LT}^∞ в нуль, в то время как для чистой модели Изинга $X_{LT}^\infty = 0.751(24)$.

7. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ПРИ ЭВОЛЮЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ НАЧАЛЬНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ

В данном разделе представлено исследование двумерной структурно неупорядоченной модели Изинга, эволюционирующей из состояний с различными значениями начальной намагниченности $t_0 = 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 0.9, 1.0$. Поведение систем исследовалось на временах до 10 000 шагов Монте-Карло на спин. При моделировании чистой системы с $p = 1.0$

Таблица 1. Значения флюктуационно-диссипативного отношения для различных спиновых концентраций p при эволюции систем из высокотемпературного начального состояния с $t_0 = 0.01$

	$p = 1.0$	$p = 0.95$	$p = 0.9$	$p = 0.85$	$p = 0.8$	$p = 0.75$	$p = 0.7$
t_w	$X_{HT}^{(t=t_w \gg t_w)}$						
20	0.347(19)	0.313(18)	0.264(17)	0.247(20)	0.216(21)	0.186(18)	0.166(17)
40	0.345(23)	0.322(20)	0.289(19)	0.265(22)	0.234(23)	0.190(19)	0.170(17)
60	0.343(26)	0.326(22)	0.297(23)	0.271(23)	0.241(25)	0.191(19)	0.172(18)
80	0.341(21)	0.327(21)	0.303(25)	0.275(26)	0.247(28)	0.192(21)	0.173(19)
∞	0.339(19)	0.332(19)	0.317(21)	0.283(21)	0.256(23)	0.194(19)	0.175(18)
X_{HT}^{∞}	0.339(19)	0.332(19)	0.317(21)	0.283(21)	0.256(23)	0.194(19)	0.175(18)

проводилось статистическое усреднение по 15000 прогонок. При моделировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 2000 примесным конфигурациям и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации.

Для выявления зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости от начальных значений намагниченности t_0 удобно в качестве времени ожидания выбрать величину, пропорциональную времени наблюдения, например $t_w = t/3$, тогда скейлинговые формы для данных функций примут вид [28]

$$\begin{aligned} C(t, t_w = t/3, t_m) &= t^{-2\beta/z\nu} G_C(tm_0^k), \\ \chi(t, t_w = t/3, t_m) &= t^{-2\beta/z\nu} G_\chi(tm_0^k), \end{aligned} \quad (19)$$

где $G_{C,\chi}(t/t_m) = G_{C,\chi}(tm_0^k)$ — скейлинговые функции.

На рис. 11 и 12 представлены временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w, t_m)$ и восприимчивости $\chi(t, t_w, t_m)$ для времен ожидания $t_w = t/3$ и различных значений начальной намагниченности для систем со спиновыми концентрациями $p = 1.0, p = 0.9, p = 0.8, p = 0.7$. Наблюдаемый для структурно неупорядоченных систем с $p = 0.9, p = 0.8, p = 0.7$ нефизический рост автокорреляционных функций при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $t_0 = 1$ объясняется необходимостью учета логарифмических поправок.

Введение временных логарифмических поправок в виде зависимости $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ от времени наблюдения t для системы с $p = 0.95$ и $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ от t для $p \leq 0.9$ ($c_a = 2/z - \theta'$ — показатель убывания автокорреляционной функции) позволяет устранить такое нефизическое поведение автокорреляционной функции (рис. 13),

которое теперь демонстрирует временное убывание в течение всего процесса эволюции системы. Эффекты старения в поведении автокорреляционной функции и динамической восприимчивости наглядно проявляются (рис. 13, 14) через отклонение зависимостей $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$, $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} \chi(t, t/3)$ для системы с $p = 0.95$ и $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$, $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} \chi(t, t/3)$ для $p \leq 0.9$ от степенной (при постоянном значении t_w), имеющей вид прямой в двойном логарифмическом масштабе, и характеризуются замедлением корреляции и релаксации системы с увеличением ее «возраста» t_w . На представленных на рис. 13 и 14 графиках видно, что в поведении автокорреляционной функции эффекты старения проявляются сильнее, чем в поведении восприимчивости. Кроме того, из анализа данных графиков можно сделать вывод, что с ростом начального значения намагниченности t_0 эффекты старения усиливаются.

Для проверки осуществления скейлинговых соотношений (19) были построены зависимости $t^{2\beta/(z\nu)} C(t, t/3)$ от $x = tm_0^k$. На рис. 15a видно, что в случае чистой системы с $p = 1.0$ наблюдается коллапс данных для различных значений начальной намагниченности t_0 на единой универсальной кривой.

Однако временное поведение автокорреляционной функции для структурно неупорядоченных систем, представленное на рис. 15б, в, демонстрирует нарушение скейлингового соотношения (19), что связано с существенным влиянием дефектов структуры на корреляционные свойства системы на неравновесном этапе ее эволюции при старте из низкотемпературных начальных состояний с $t_0 \neq 0$ [39]. Представление зависимости $C(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) t^{2\beta/(\mu z\nu)}$ от $x = t^\mu m_0^k$ позволяет

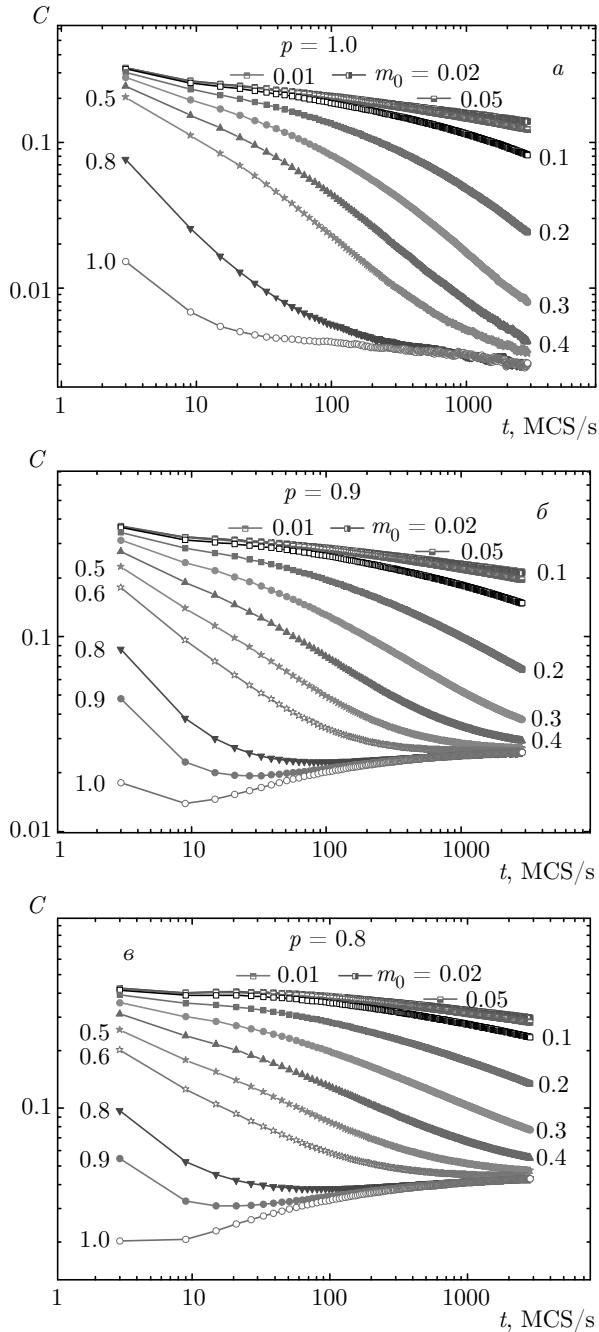


Рис. 11. Неравновесные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t/3)$ от времени наблюдения t для систем с разными спиновыми концентрациями p при эволюции из различных начальных состояний с $0.01 \leq m_0 \leq 1.0$

при значениях показателя сверхстарения μ , равных $\mu(p = 0.95) = 6.10(5)$, $\mu(p = 0.9) = 6.25(5)$, $\mu(p = 0.85) = 6.50(5)$, $\mu(p = 0.8) = 6.75(5)$, $\mu(p = 0.75) = 7.05(5)$, $\mu(p = 0.7) = 7.50(5)$, получить совпадение данных для скейлинговой функции $G_C(t^\mu m_0^k)$ на соответствующих универсальных

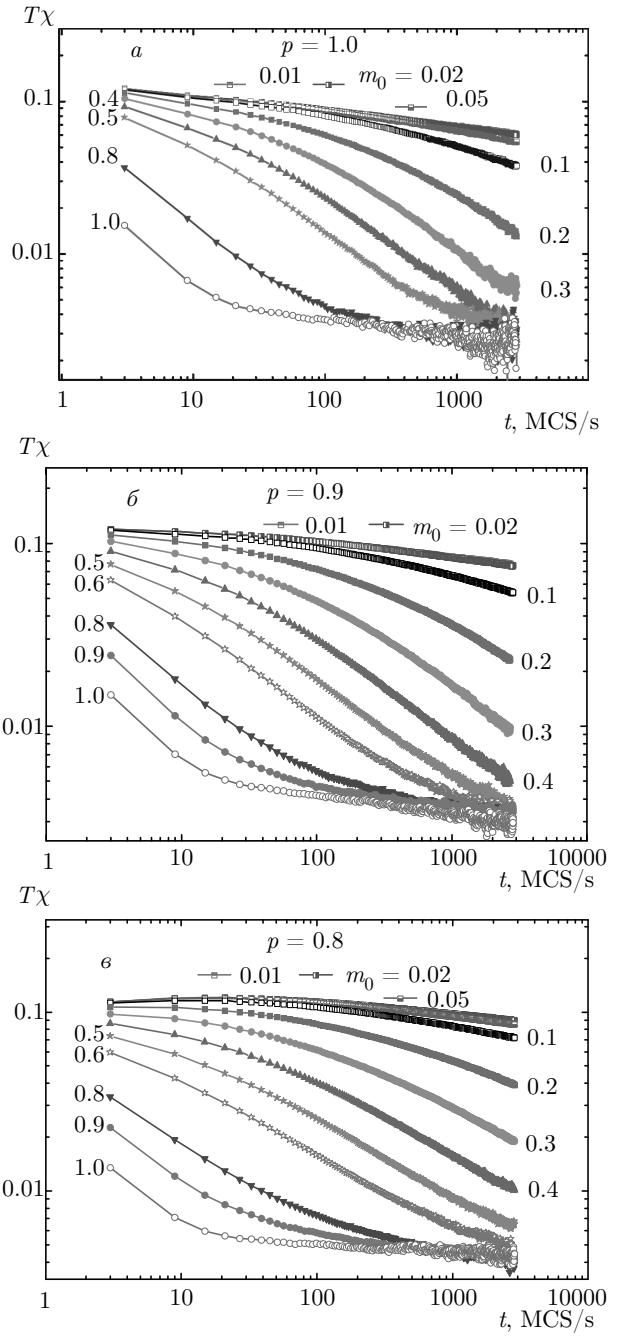


Рис. 12. Неравновесные зависимости динамической восприимчивости $T\chi(t, t/3)$ от времени наблюдения t для систем с разными спиновыми концентрациями p при эволюции из различных начальных состояний с $0.01 \leq m_0 \leq 1.0$

кривых при значениях начальной намагниченности $0.5 \leq m_0 \leq 1$ и распределение данных в виде параллельно расположенных графиков для $0.01 \leq m_0 \leq 0.4$ (рис. 16). Это указывает на то, что в структурно неупорядоченных системах для автокорреляционной функции реализуется более

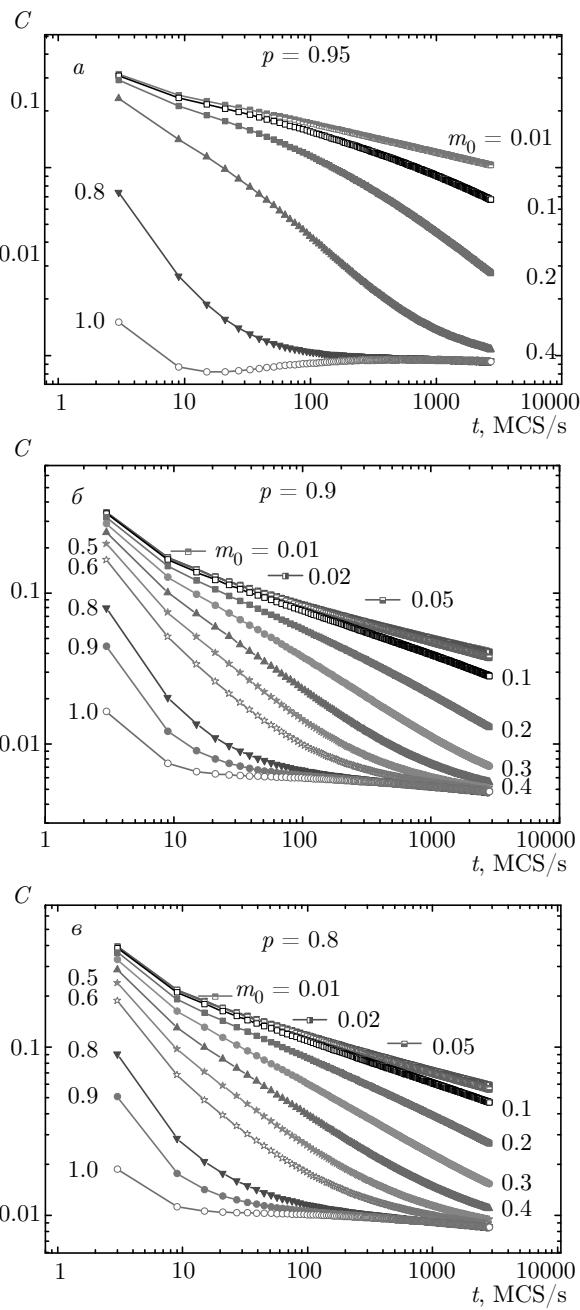


Рис. 13. Неравновесные зависимости $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ для системы со спиновой концентрацией $p = 0.95$ (а) и $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ для систем с $p = 0.9$ (б) и $p = 0.8$ (в), демонстрирующие влияние логарифмических поправок в поведении автокорреляционной функции при эволюции из различных начальных состояний с $0.01 \leq m_0 \leq 1.0$

сложная скейлинговая зависимость вида

$$C(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) = t^{-2\beta/\mu z\nu} G_C(t^\mu m_0^k). \quad (20)$$

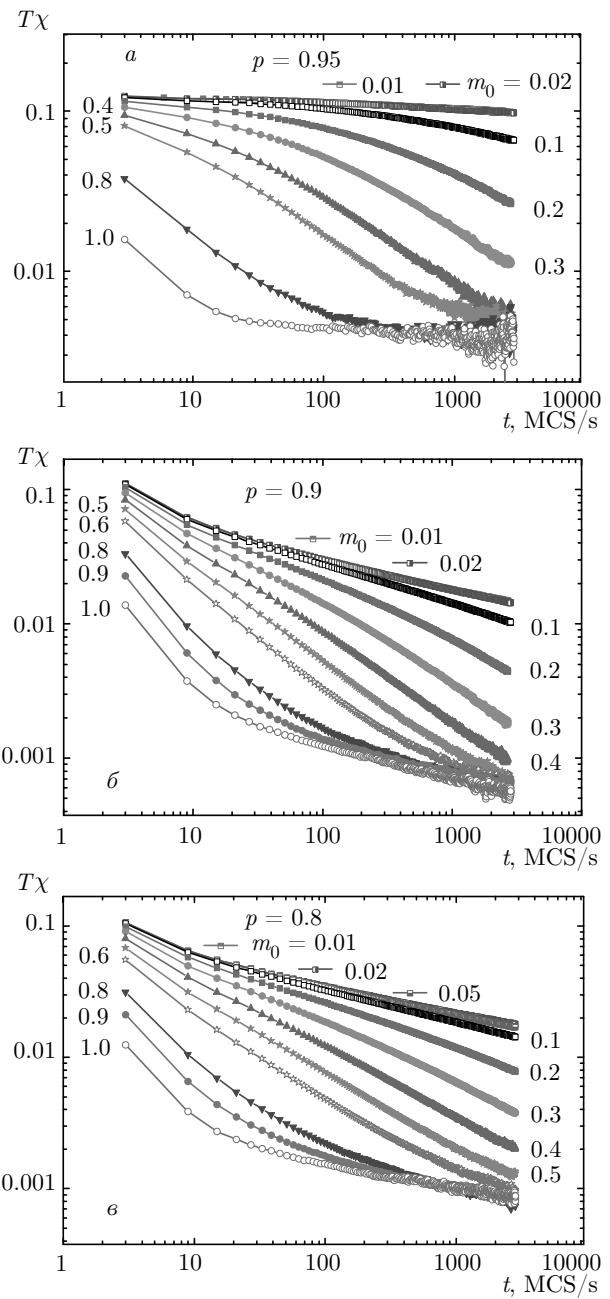


Рис. 14. Неравновесные зависимости $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} T\chi(t, t/3)$ для системы со спиновой концентрацией $p = 0.95$ (а) и $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} T\chi(t, t/3)$ для систем с $p = 0.9$ (б) и $p = 0.8$ (в), демонстрирующие влияние логарифмических поправок в поведении динамической восприимчивости при эволюции из различных начальных состояний с $0.01 \leq m_0 \leq 1.0$

Таким образом, поведение автокорреляционной функции для систем, релаксирующих из начальных состояний с различными значениями начальной намагниченности m_0 , характеризуется принад-

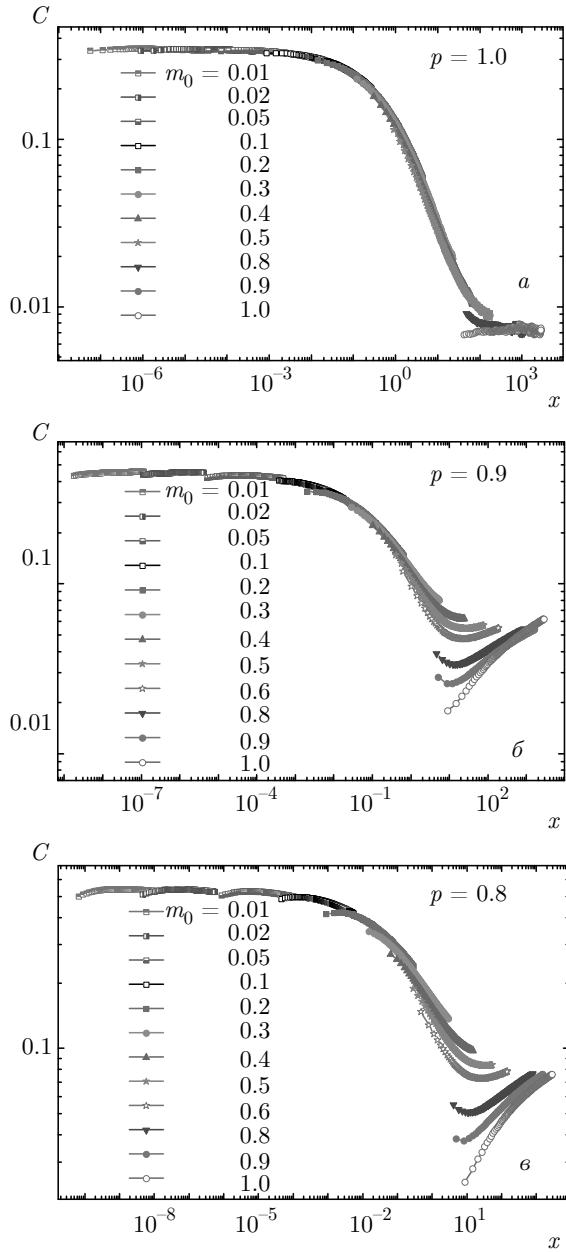


Рис. 15. Скейлинговые зависимости $t^{2\beta/(z\nu)}C(t, t/3)$ от $x = tm_0^k$ для систем с разной концентрацией спинов p

лежностью к двум подклассам универсального неравновесного критического поведения. Один из них соответствует типу низкотемпературного начального состояния, включающего в себя состояния с $0.5 \leq m_0 \leq 1$. В этом случае скейлинговая временная зависимость автокорреляционной функции для чистой модели Изинга описывается соотношениями теории канонического старения с $\mu = 1$, а для структурно неупорядоченной модели Изинга — соотношениями теории сверхстарения

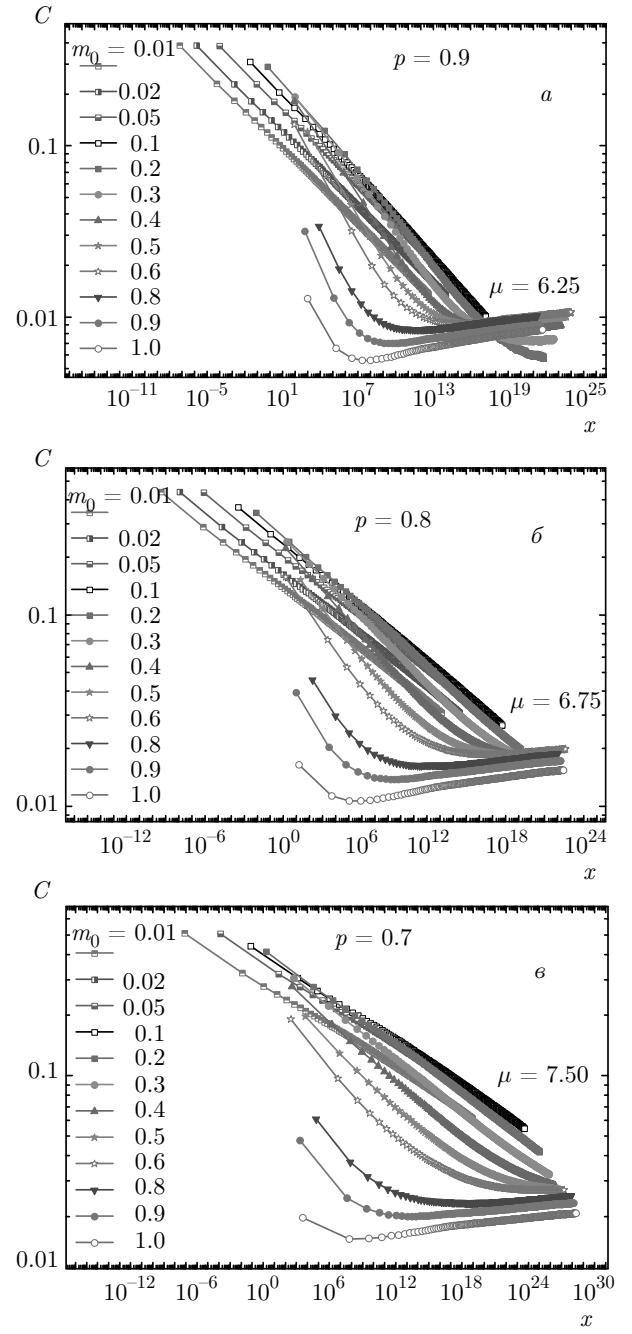


Рис. 16. Эффекты сверхстарения, наблюдаемые в зависимости скейлинговой функции $G_C(t^\mu m_0^k) = C(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) t^{2\beta/(z\nu)}$ от переменной $x = t^\mu m_0^k$, с $\mu = 6.25$ для системы с концентрацией спинов $p = 0.9$ (а), $\mu = 6.75$ для $p = 0.8$ (б) и $\mu = 7.50$ для $p = 0.7$

с $\mu > 1$. Другой подкласс универсального неравновесного критического поведения соответствует типу высокотемпературного начального состояния, включающего в себя состояния с $m_0 < 0.4$. В этом случае автокорреляционная функция описывается

скейлинговыми формами, соответствующими каноническому старению как для чистой системы, так и для структурно неупорядоченных систем с $\mu = 1$.

Наблюдаемое для начальных состояний с намагниченностями $0.5 \leq m_0 \leq 1$ изменение режима поведения автокорреляционной функции на долговременном этапе с $t \gg t_w$ связано с сильным замедлением эффектов корреляции вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. Данная особенность в поведении автокорреляционной функции была выявлена нами ранее в структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга, эволюционирующей из низкотемпературного полностью упорядоченного начального состояния с $m_0 = 1$ с реализацией для $C(t, t_w)$ эффектов сверхстарения [39]. Для начальных состояний с $0.01 \leq m_0 < 0.4$ поведение автокорреляционной функции не меняется ни на этапе старения с $t \approx t_w$, ни на долговременном этапе с $t \gg t_w$ и характеризуется одним режимом поведения.

Таблица 2. Значения флюктуационно-диссипативного отношения для систем с различными спиновыми концентрациями p при различных значениях начальной намагниченности m_0

m_0	$X^\infty(p, m_0)$			
	$p = 1.0$	$p = 0.9$	$p = 0.8$	$p = 0.7$
0.01	0.335(17)	0.316(20)	0.255(21)	0.181(16)
0.02	0.336(19)	0.317(19)	0.252(20)	0.181(15)
0.05	0.338(18)	0.314(19)	0.251(19)	0.182(16)
0.1	0.334(19)	0.313(18)	0.255(19)	0.181(15)
0.2	0.334(19)	0.316(19)	0.254(18)	0.182(16)
0.3	0.331(18)	0.313(19)	0.256(19)	0.184(17)
0.4	0.339(19)	0.314(21)	0.258(20)	0.185(17)
0.5	0.742(32)	0	0	0
0.6	0.749(31)	0	0	0
0.8	0.752(33)	0	0	0
0.9	0.750(32)	0	0	0
1.0	0.751(33)	0	0	0

8. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНОГО ОТНОШЕНИЯ ПРИ ЭВОЛЮЦИИ ИЗ СОСТОЯНИЙ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ НАЧАЛЬНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ

На следующем этапе мы исследовали влияние различных начальных состояний на значения предельного флюктуационно-диссипативного отношения (ФДО). Рассчитывалась временная зависимость динамической восприимчивости $\chi(t, t_w, t_m)$ и автокорреляционной функции $C(t, t_w, t_m)$ для различных значений начальных намагниченностей m_0 при времени ожидания равном $t_w = t/9$, которое лучше соответствует условию $t - t_w \gg t_w$ для долговременного этапа эволюции системы — области универсальности неравновесной динамики. С учетом логарифмических поправок соотношение (18) перепишется для структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга в виде

$$X(t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T_c \frac{\partial \left[(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} \chi(t, t_w) \right]}{\partial \left[(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t_w) \right]} \quad (21)$$

для систем со спиновыми концентрациями $0.9 < p < 1.0$ и в виде

$$X(t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T_c \frac{\partial \left[(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} \chi(t, t_w) \right]}{\partial \left[(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t_w) \right]} \quad (22)$$

для систем со спиновыми концентрациями $p \leq 0.9$.

Представленная на рис. 17 для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.9$ и $p = 0.8$ параметрическая зависимость $T_c(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} \chi(t, t/9, t_m)$ от $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/9, t_m)$ позволяет получить значения предельного ФДО X^∞ в соответствии с соотношением (22). На рис. 17 видно, что в случае начальных состояний с намагниченностью $0.01 \leq m_0 < 0.4$ системы со всеми спиновыми концентрациями характеризуются линейной зависимостью $T_c \chi$ от C и предельными значениями ФДО, представленными в табл. 2. Эти значения в пределах погрешности совпадают со значениями для высокотемпературного начального состояния $X_{HT}^\infty = 0.339(19)$ ($p = 1.0$), $X_{HT}^\infty = 0.317(21)$ ($p = 0.9$), $X_{HT}^\infty = 0.256(23)$ ($p = 0.8$) и $X_{HT}^\infty = 0.175(18)$.

В случае начальных состояний с намагниченностью $0.5 \leq m_0 \leq 1$ предельное значение ФДО для чистой системы ($p = 1.0$) хорошо согласуется с найденным в [39] значением $X_{LT}^\infty = 0.751(24)$ для низкотемпературного полностью упорядоченного состояния с $m_0 = 1$. Для структурно неупорядоченных систем с начальными намагниченностями $0.5 \leq m_0 \leq 1$ предельное ФДО $X^\infty = 0$, что связано

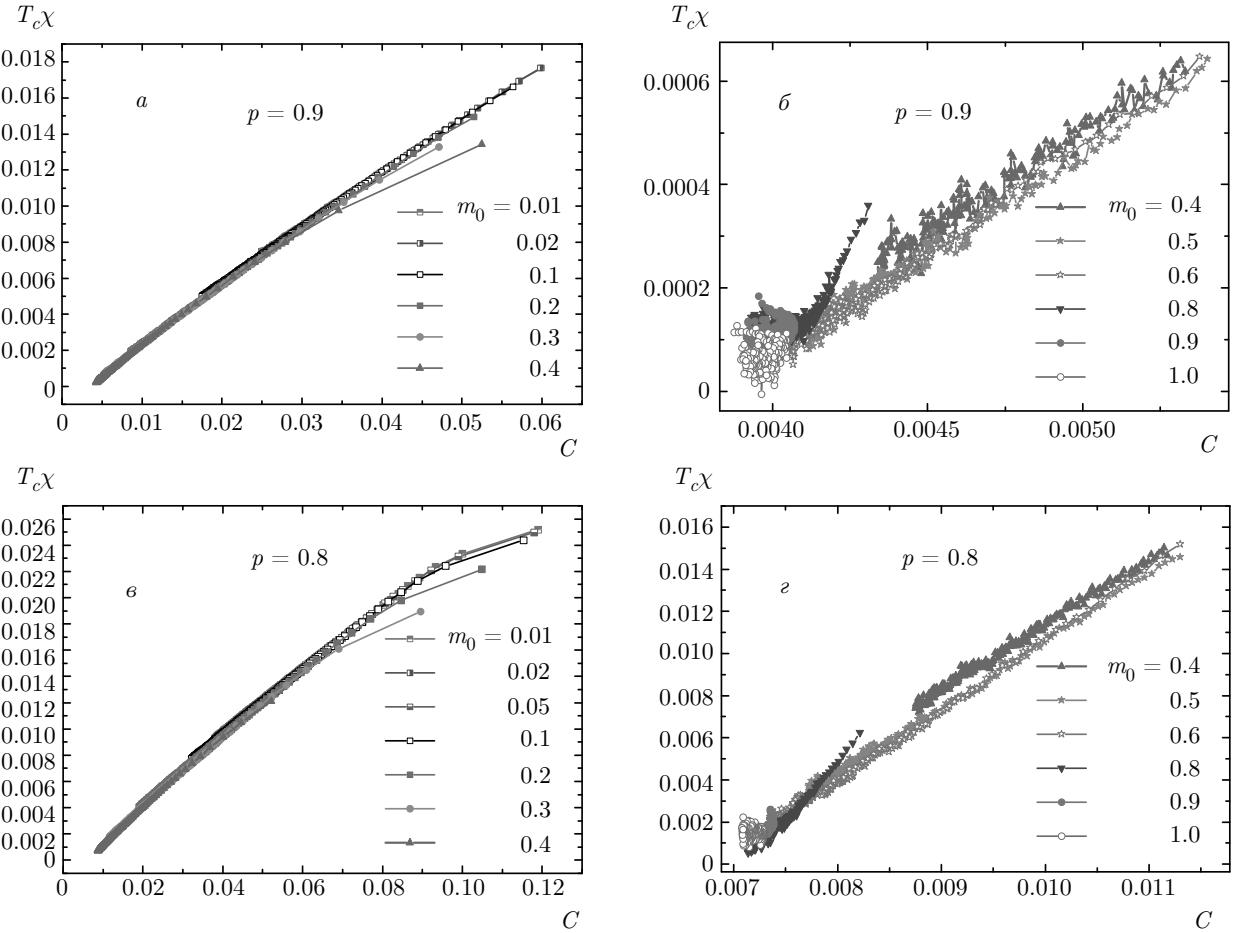


Рис. 17. Параметрическая зависимость $T_c(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2}\chi(t, t/9, t_m)$ от $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2}C(t, t/9, t_m)$ для систем с разными p при различных значениях начальной намагниченности m_0

с сильным замедлением корреляционных эффектов на временах $t \gg t_w$ вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что в результате численных исследований выявлены существенные особенности влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга при ее эволюции из различных начальных состояний. На основе анализа временной зависимости намагниченности, двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости было выявлено проявление логарифмических поправок и кроссоверных явлений перекорреляционного поведения на неравновесные характеристики и критические индексы структурно неупорядоченной модели.

Показано, что неравновесное критическое поведение систем, релаксирующих из начальных состояний с различными значениями начальной намагниченности m_0 , характеризуется принадлежностью к двум подклассам универсального неравновесного критического поведения с характерными значениями предельного флюктуационно-диссипативного отношения. Один из них соответствует типу низкотемпературного начального состояния, включающего в себя состояния с $0.5 \leq m_0 \leq 1$. В этом случае скейлинговая временная зависимость автокорреляционной функции для чистой модели Изинга описывается соотношениями теории канонического старения, а для структурно неупорядоченной модели Изинга — теории сверхстарения [28]. Другой подкласс универсального неравновесного критического поведения соответствует типу высокотемпературного начального состояния, включающего в себя состояния с $m_0 < 0.4$. В этом случае автокорреляционная

функция описывается скейлинговыми формами, соответствующими каноническому старению, для систем со всеми значениями спиновых концентраций. Случай начальной намагниченности $m_0 = 0.4$ является переходным, когда поведение автокорреляционной функции на временах $t \geq t_w$ соответствует типу неравновесного критического поведения с высокотемпературным начальным состоянием, а на долговременном этапе с $t \gg t_w$ — низкотемпературному типу начальных состояний. С увеличением концентрации дефектов поведение автокорреляционной функции для системы с $m_0 = 0.4$ все более соответствует подклассу высокотемпературного начального состояния.

Показано, что неравновесная критическая динамика слабонеупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p \geq 0.9$ относится к классу универсальности неравновесного критического поведения «чистой» модели и характеризуется одинаковыми критическими показателями и значениями предельного флюктуационно-диссипативного отношения, а неравновесное критическое поведение систем с $p \leq 0.85$ демонстрирует зависимость универсальных характеристик неравновесного критического поведения от концентрации дефектов и нарушение динамического скейлинга, что связано с влиянием кроссоверных эффектов переколяционного поведения [23, 24, 39].

Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М. В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 17-12-00279, 18-42-550003, 19-32-50006, 20-32-70189) и гранта МД-6868.2018.2 Президента РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
2. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
3. R. B. Stinchcombe, *Dilute Magnetism*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Vol. 7, Acad. Press, New York (1983), p. 151.
4. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
5. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
6. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
7. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
8. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем*, Наука, Москва (2013).
9. P. E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, and W. Janke, Eur. Phys. J. B **38**, 463 (2004).
10. M. Hasenbusch, F. P. Toldin, A. Pelissetto, and E. Vicari, J. Stat. Mech. **2007**, P02016 (2007).
11. Вик. С. Доценко, Вл. С. Доценко, Письма в ЖЭТФ **33**, 40 (1981).
12. Б. Н. Шалаев, ФТТ **26**, 1811 (1984).
13. B. N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994).
14. J. S. Wang, W. Selke, Vl. S. Dotsenko, and V. B. Andreechenko, Physica A **164**, 221 (1990).
15. A. L. Talapov and L. N. Shchur, Europhys. Lett. **27**, 193 (1994).
16. A. L. Talapov and L. N. Shchur, J. Phys.: Cond. Mat. **6**, 8295 (1994).
17. W. Selke, L. N. Shchur, and A. L. Talapov, Ann. Rev. Comput. Physics I, ed. by D. Staufer, World Scientific (1995), p. 17.
18. J. K. Kim and A. Patrascioiu, Phys. Rev. Lett. **72**, 2785 (1994).
19. S. L. A. de Queiroz and R. B. Stinchcombe, Phys. Rev. B **50**, 9976 (1994).
20. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor et al., J. Phys. A **30**, 8379 (1997).
21. W. Selke, L. N. Shchur, and O. A. Vasilyev, Physica A **259**, 388 (1998).
22. L. N. Shchur and O. A. Vasilyev, Phys. Rev. E **65**, 016107 (2001).
23. О. Н. Марков, В. В. Прудников, Письма в ЖЭТФ **60**, 24 (1994).
24. V. V. Prudnikov and O. N. Markov, Europhys. Lett. **29**, 245 (1995).
25. E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J. P. Bouchaud, and L. F. Cugliandolo, Lect. Notes Phys. **492**, 184 (1997).

- 26.** L. Berthier and J. Kurchan, *Nature Phys.* **9**, 310 (2013).
- 27.** P. Calabrese and A. Gambassi, *J. Phys. A* **38**, R133 (2005).
- 28.** В. В. Прудников, П. В. Прудников, М. В. Мамонова, *УФН* **187**, 817 (2017).
- 29.** F. Ricci-Tersenghi, *Phys. Rev. E* **68**, 065104 (2003).
- 30.** C. Godreche, F. Krzakala, and F. Ricci-Tersenghi, *J. Stat. Mech.* **2004**, P04007 (2004).
- 31.** В. В. Прудников, П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, Письма в ЖЭТФ **98**, 693 (2013).
- 32.** P. Calabrese, A. Gambassi, and F. Krzakala, *J. Stat. Mech.* **2006**, P06016 (2006).
- 33.** W. Janke, in *Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin, Vol. 739 (2008), p. 79.
- 34.** P. H. L. Martins and J. A. Plascak, *Phys. Rev. E* **76**, 012102 (2007).
- 35.** H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989).
- 36.** M. P. Nightingale and H. W. J. Blote, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4548 (1996).
- 37.** D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis, London (1991).
- 38.** J. Hoshen and R. Kopelman, *Phys. Rev. B* **14**, 3428 (1976).
- 39.** В. В. Прудников, П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, П. Н. Маляренко, Письма в ЖЭТФ **107**, 595 (2018).