

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВО Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского

На правах рукописи

Вакилов Андрей Николаевич

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО
КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СТРУКТУРНО
НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СЛОЖНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

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

Омск - 2019

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Фазовые переходы второго рода и критические явления	20
1.1. Теория описания фазовых переходов II рода	20
1.1.1. Критические показатели (индексы). Соотношения между критическими индексами	22
1.1.2. Гипотеза подобия	25
1.1.3. Метод ренормгруппы и ε -разложения	34
1.2. Влияние дефектов структуры на критическое поведение	43
1.3. Компьютерное моделирование фазовых переходов	49
1.3.1. Релаксационные свойства модели. Установление состоя- ния равновесия	55
1.3.2. Применение кластерного метода Вольфа для уменьшения эффектов критического замедления	57
1.3.3. Моделирование критического поведения неупорядоченных систем	58
1.4. Основные понятия и модельные представления теории неравно- весного поведения	60
1.5. Выводы	68
Глава 2. Компьютерное моделирование равновесного критическо- го поведения структурно неупорядоченных магнетиков	70
2.1. Модель и методика моделирования	71
2.2. Метод конечноразмерного скейлинга и результаты моделирования	73
2.3. Расчет критических характеристик	82
2.4. Основные результаты и выводы	86
2.5. Нули статистической суммы и критическое поведение трехмер- ной неупорядоченной модели Изинга	88
2.5.1. Метод и вычисляемые величины	88
2.5.2. Параметры моделирования и результаты	90
2.6. Выводы	92
Глава 3. Исследование низкотемпературного поведения неупоря- доченного антиферромагнетика со случайными полями мето-	

дом параллельного отжига	93
3.1. Модель и вычисляемые величины	95
3.2. Метод параллельного отжига	96
3.3. Результаты моделирования и их обсуждение	99
3.4. Выводы	105
Глава 4. Компьютерное моделирование критической динамики трехмерных неупорядоченных магнетиков	106
4.1. Определение критического индекса z для одородной и неупорядоченной модели Изинга	106
4.2. Обсуждение результатов моделирования	112
4.3. Выводы	114
Глава 5. Теоретико-полевое описание неравновесного критического поведения однородных и неупорядоченных магнитных систем	116
5.1. Определение модели и методика описания динамики неупорядоченных систем.	116
5.2. Получение ренорм-групповых уравнений и определение скейлинговых функций.	119
5.3. Расчет индекса z и анализ результатов	122
5.4. Проявление эффектов критической динамики неупорядоченных систем в эксперименте	126
5.5. Выводы	126
Глава 6. Компьютерное моделирование неравновесного критического поведения неупорядоченных магнетиков методом коротковременной динамики	128
6.1. Метод коротковременной динамики	129
6.2. Исследование влияния начального неравновесного состояния с $m_0 \ll 1$	131
6.3. Исследование влияния начального неравновесного состояния с $m_0 = 1$	139

6.4. Коротковременная динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем	145
6.5. Выводы	153
Глава 7. Исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно - диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении однородных и структурно неупорядоченных магнетиков	155
7.1. Методика определения функции отклика и флуктуационно-диссипативного отношения при применении алгоритма тепловой бани	157
7.2. Исследование влияния дефектов структуры на свойства старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга	160
7.2.1. Модель, вычисляемые величины и параметры моделирования	160
7.2.2. Результаты моделирования	163
7.3. Выводы	167
Заключение	169
Список работ, опубликованных автором по теме диссертации	172
Список литературы	178

Введение

Актуальность темы исследования

Задачи теории фазовых переходов и критических явлений в однородных и неупорядоченных системах являются одними из наиболее сложных и постоянно актуальных задач статистической теории и физики конденсированного состояния [1–13]. Наблюдаемые по мере приближения к точке фазового перехода аномально большие по амплитуде и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных характеризуются эффективно сильным взаимодействием между собой. Большой практический интерес к изучению фазовых переходов обусловлен тем, что вблизи температуры фазового перехода даже незначительное изменение внешних условий может вызвать существенное изменение характеристик системы. Многие передовые технологии в техническом перевооружении человечества, реализованные на протяжении последних десятилетий, опираются на использование сильного изменения свойств различных материалов при фазовых переходах в них. Структурный беспорядок, обусловленный присутствием примесей или других дефектов структуры, наличие в эффективном гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, задающих состояние системы, зачастую играют важную роль в поведении реальных материалов и физических систем. Эти факторы, действующие по отдельности или проявляющиеся одновременно в структурно неупорядоченных системах, могут индуцировать новые типы фазовых переходов, задавать новые классы универсальности критического поведения, модифицировать кинетические свойства систем и обуславливать низкочастотные особенности в динамике системы. Поэтому усилия многих исследователей были направлены на понимание того, как характеристики фазовых переходов изменяются с введением в систему случайно распределенных примесей. Рассеяние флуктуаций на дефектах структуры, вызывающих нарушение трансляционной инвариантности системы, обуславливает дополнительное взаимодействие флуктуаций параметра порядка, характеризующееся специфическими законами сохранения. Особенно интересно влияние замороженных дефектов, присутствие которых может проявляться в виде случайного возмущения локальной температуры перехода, например для ферро- и антиферромагнитных систем в отсутствие внешнего магнитного поля, или как случайные магнитные поля для антиферромагнитных

систем в однородном магнитном поле. Исследования показали [14,15], что присутствие случайно распределенных замороженных примесей изменяет свойства системы вблизи критической точки, если теплоемкость системы расходитесь в критической точке с индексом $\varphi = \alpha > 0$. Данному критерию удовлетворяют системы, эффективный гамильтониан которых в критической точке изоморфен гамильтониану модели Изинга. Для теоретического анализа поведения таких систем разработаны сложные методы ренормгруппового и теоретико-полевого описания. Используемые при этом приближения, как и в случае других систем с сильным взаимодействием, требуют для их обоснования сопоставления достигнутых результатов с результатами физического или компьютерного эксперимента. Компьютерное моделирование критических явлений дает возможность получения наглядной информации о росте флуктуаций и критическом замедлении процессов релаксации в системах по мере приближения к температуре фазового перехода, о проявлении аномальных свойств в поведении теплоемкости и восприимчивости системы к изменению внешних полей. Исследованиям ренормгрупповыми методами, численными методами Монте-Карло и экспериментальным исследованиям критического поведения неупорядоченных изингоподобных магнетиков к настоящему моменту посвящено значительное число работ [16–42]. И если на вопрос о существовании нового класса универсальности критического поведения, который образуют структурно неупорядоченные изингоподобные магнетики, уже получен положительный ответ, то вопросы о независимости асимптотических значений критических индексов от степени разбавления системы, мере влияния кроссоверных эффектов на эти значения, а также о возможности существования двух или более режимов критического поведения для слабо и сильно неупорядоченных систем остаются открытыми и горячо обсуждаются. Одной из нерешенных задач теории критических явлений остается описание неравновесного критического поведения макроскопических систем, далеких от состояния равновесия. Это прежде всего относится к явлениям критической релаксации однородных и структурно неупорядоченных систем при фазовых переходах второго рода и фазовых переходах первого рода, близких ко второму. Критическое замедление времени релаксации и аномально большие времена корреляции различных состояний для данных систем приводят к реализации динамического скейлингового поведения, даже когда системы находятся в состояниях, далеких от состояния

равновесия. В последние годы исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает значительный интерес как с теоретической, так и экспериментальной точек зрения [43,44]. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризуемыми нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Хорошо известными примерами подобных систем с медленной динамикой и эффектами старения являются такие комплексные неупорядоченные системы, как спиновые стекла. Однако данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [45], могут наблюдаться и в системах, испытывающих фазовые переходы второго рода, так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации. Отметим, что 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, оказывается новой универсальной характеристикой для критического поведения различных систем. Ренормгрупповые, численные и экспериментальные методы исследования критической динамики структурно неупорядоченных систем позволили к настоящему времени однозначно установить, что присутствие в системах, как некоррелированных дефектов структуры, так и дефектов с эффектами дальнедействующей корреляции приводит к новым типам критического поведения и заметному усилению эффектов критического замедления по сравнению с «чистыми» системами. В связи с этим особенности неравновесного поведения, такие как эффекты старения, несомненно должны найти более яркое проявление в структурно неупорядоченных системах с новыми универсальными значениями флуктуационно-диссипативного отношения.

В последнее десятилетие широкое распространение получили компьютерные методы моделирования как статического, так и динамического критического поведения различных систем. В результате возникла потребность в более точных значениях критических индексов для однородных и слабо неупорядоченных систем, вычисляемых теоретически, и в проведении компьютерного моделирования критического поведения систем при изменении концентрации примесей в широком интервале. Статистические особенности описания систем

с замороженным беспорядком и эффекты критического замедления, усиливаемые дефектами структуры, создают значительные трудности как для аналитического описания, так и для численного моделирования поведения подобных систем. Поэтому для их исследования требуется развитие новых концепций и методов описания.

Цель работы

Разработка методик численного моделирования критического поведения, вычисление критических характеристик и исследование зависимости асимптотических значений критических индексов от концентрации примесных атомов в структурно неупорядоченных спиновых системах.

Задачи диссертационной работы

1. Провести численное исследование критического поведения структурно неупорядоченных трехмерных магнетиков в широкой области изменения концентрации спинов. Используя суперкомпьютерные технологии в процессе исследования выбрать широкий интервал изменения линейных размеров решеток, использовать высокую статистику в процессе усреднения термодинамических и корреляционных функций по различным примесным конфигурациям. Применить для обработки результатов моделирования методику конечноразмерного скейлинга, позволяющую наряду с асимптотическими значениями термодинамических функций получить для них скейлинговые функции и учесть поправки к скейлингу для выделения асимптотических значений критических индексов.
2. Провести численное исследование низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями методом параллельного отжига. Выявить типы магнитного упорядочения, реализуемые в случае слабого и сильного структурного беспорядка.
3. Осуществить компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерном неупорядоченном магнетике с

замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси. Разработать процедуру блочного разбиения спиновых примесных систем и определения динамического критического индекса в широкой области изменения концентрации примеси.

4. Осуществить теоретико-полевое описание критической динамики магнитных чистых и слабо неупорядоченных систем с замороженными немагнитными примесями. Непосредственно для трехмерных систем (т.е. без использования традиционного метода ε - разложения) получить выражение для динамических скейлинговых функций. Применяя метод суммирования Паде-Бореля к асимптотическому ряду разложения для динамических скейлинговых функций провести расчет динамического критического индекса z .
5. Провести анализ влияние слабого беспорядка, создаваемого присутствием примеси, на динамическое критическое поведение двумерных изинговских систем. Осуществить расчет динамического критического индекса z для двумерной модели Изинга.
6. Исследовать методом коротковременной динамики критическое поведение трехмерных структурно неупорядоченных ферромагнетиков. На основе результатов моделирования вычислить значения критических индексов.
7. Выполнить компьютерное моделирование методом возмущения начального состояния системы критического поведения структурно неупорядоченных систем. По результатам моделирования определить критическую температуру и динамический критический индекс z .
8. Исследовать эффекты старения в неравновесном критическом поведении трехмерных однородных и структурно неупорядоченных магнетиков.

Научная новизна

Новизна представленных в диссертационной работе результатов и выводов заключается в следующем:

1. Применение суперкомпьютерных технологий при моделировании методами Монте-Карло статического и динамического критического поведения структурно неупорядоченных спиновых систем позволило для вычисления скейлинговых функций термодинамических величин и значений равновесных и динамических критических индексов использовать усреднение по большому количеству примесных конфигураций (от 3000 - до 50000) и широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20 - 400$. Все это позволяет считать, что полученные результаты носят уникальный характер.
2. Вычисленные скейлинговые функции и значения критических индексов для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального критического поведения для неупорядоченных магнетиков с различными характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем.
3. Впервые осуществлено компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных магнетиков и вычисление критического динамического индекса z в широкой области изменения концентрации примесей. Предложена гипотеза ступенчатой универсальности трехмерных неупорядоченных изинговских магнетиков.
4. Впервые проведено теоретико - полевое описание критической динамики магнитных чистых и неупорядоченных систем с замороженными немагнитными примесями. В рамках теоретико-полевого подхода непосредственно для трехмерных систем (т.е. без использования традиционного метода ε - разложения) получено выражение для динамических скейлинговых функций. Применяя метод суммирования Паде-Бореля к асимптотическому ряду разложения для динамических скейлинговых функций проведен расчет динамического критического индекса z . Проведен анализ влияния слабой неоднородности, создаваемой присутствием примеси, на динамическое критическое поведение двумерных изинговских систем. Осуществлен расчет динамического критического индекса z для двумерной модели Изинга.
5. При применении численного метода параллельного отжига при исследо-

вании низкотемпературного поведения трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели со случайными магнитными полями было наглядно показано, что для слабо неупорядоченных систем реализуется антиферромагнитное упорядоченное состояние, в то время как в области сильного структурного беспорядка эффекты случайных магнитных полей приводят к осуществлению нового фазового состояния системы. Оно характеризуется сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы с реализацией спин-стекольного основного состояния системы.

6. Впервые методом коротковременной динамики получены критические индексы структурно неупорядоченных магнетиков при различных концентрациях точечных дефектов.
7. Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении однородных и структурно неупорядоченных магнетиков, а также на то, что присутствию дефектов структуры приводит к увеличению значения X^∞ . Отличия в значение X^∞ для однородных, слабо неупорядоченных и сильно неупорядоченных систем позволяют сделать вывод, что неравновесное критическое поведение однородных, слабо и сильно неупорядоченных систем относятся к различным классам универсальности критического поведения.

Научная и практическая значимость

Научная и практическая значимость работы заключается:

- развитые в диссертации методы и полученные результаты, вносят значительный вклад в обоснование и развитие представлений теории критических явлений в структурно неупорядоченных магнетиках.
- в разработке и реализации в программных кодах алгоритмов моделирования критического поведения неупорядоченных систем. ;
- показано, что из за слабой асимптотической сходимости рядов ε - разложения для примесных систем , применение теоретико-полевого подхода непосредственно для трехмерных неупорядоченных систем приводит к заметному отли-

чению значений динамических критических индексов.;

- Данные изменения индексов могут проявиться в эксперименте по критическому поглощению и дисперсии звука в однородных и неупорядоченных системах, а так же в ряде резонансных методах исследования динамики систем.

- при подготовке условий, анализе экспериментальных результатов критического поведения различных систем наряду с эффектами критического замедления необходимо учитывать влияние эффектов старения, значительно усиливающих эффекты критического замедления с увеличением «возраста» образца и приводящих к влиянию начальных состояний системы. При этом присутствие дефектов структуры в

системе, увеличение их концентрации приводит к существенному усилению эффектов старения.

Методы исследования

Решение поставленных в диссертации задач описания критического поведения структурно неупорядоченных спиновых систем потребовало разработки необходимой методической базы. Метод Монте-Карло при моделировании структурно неупорядоченных систем должен быть изменен. Атомам примеси ставятся в соответствие пустые узлы. Спин соответствующего пустого узла полагается равным нулю. Алгоритмы Вольфа и Метрополиса должны учитывать, что вклад в энергию взаимодействия магнитного атома с немагнитным атомом равен нулю. Искомая термодинамическая величина структурно неупорядоченной системы получается после дополнительного усреднения по полному набору различных примесных конфигураций. Метод динамической ренормгруппы, совмещенный с методом Монте-Карло был адаптирован для структурно неупорядоченных систем. Для этого был разработан алгоритм блочного разбиения неупорядоченных спиновых систем, что дало возможность вычислить динамический критический индекс для систем с различной концентрацией магнитных атомов. Метод теоретико-полевой ренормгруппы и ϵ - разложения дали возможность вычислить критические индексы чистых систем с большой точностью. При применении этого метода к структурно неупорядоченным системам оказалось, что сходимость асимптотических рядов ϵ не дает возможности получить надежные результаты. В диссертации для вычисления динамического

индекса был применен метод теоретико-полевой ренормгруппы без использования ε - разложения. Непосредственно для трехмерной системы вычислены значение динамического критического индекса в двухпетлевом приближении с применением техники суммирования Паде-Бореля.

Положения выносимые на защиту

1. Результаты применения суперкомпьютерных технологий при моделировании методами Монте-Карло статического и динамического критического поведения структурно неупорядоченных систем .
2. Вычисленные скейлинговые функции и значения критических индексов для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального критического поведения для трехмерных изинговских магнетиков с различными критическими характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем.
3. Результаты компьютерного моделирования критической динамики структурно неупорядоченных магнетиков и вычисление критического динамического индекса z в широкой области изменения концентрации примесей. Гипотеза ступенчатой универсальности трехмерных неупорядоченных изинговских магнетиков.
4. Результаты теоретико - полевого описания непосредственно для трехмерных систем (т.е. без использования традиционного метода ε - разложения) критической динамики магнитных чистых и неупорядоченных систем с замороженными немагнитными примесями. Анализ влияние слабой неоднородности, создаваемой присутствием примеси, на динамическое критическое поведение двумерных и трехмерных изинговских систем.
5. Результаты применении численного метода параллельного отжига при исследовании низкотемпературного поведения трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели со случайными магнитными полями показали, что для слабо неупорядоченных систем реализуется антиферромагнитное упорядоченное состояние, в то время как в области сильного

структурного беспорядка эффекты случайных магнитных полей приводят к осуществлению нового фазового состояния системы. Оно характеризуется сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы с реализацией спин-стекольного основного состояния системы.

6. Результаты компьютерного моделирования методом коротковременной динамики структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга при различных концентрациях точечных дефектов. Полученные значения критических индексов показывают, что критическое поведение однородных, слабо и сильно неупорядоченных систем относится к различным классам универсальности критического поведения.
7. Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении однородных и структурно неупорядоченных магнетиков, описываемых трехмерной модели Изинга, а также на то, что присутствию дефектов структуры приводит к увеличению значения X^∞ . Отличия в значение X^∞ для однородных, слабо неупорядоченных и сильно неупорядоченных систем позволяют сделать вывод, что неравновесное критическое поведение однородных, слабо и сильно неупорядоченных систем относится к различным классам универсальности критического поведения.

Достоверность результатов

Достоверность полученных методических и расчетных результатов обеспечивается их внутренней непротиворечивостью, соответствием современным представлениям физики критических явлений, согласием с результатами экспериментов и предыдущих теоретических работ.

Апробация результатов

Основные результаты диссертационной работы докладывались на конференциях: Всесоюзный семинар “Акустика неоднородных сред” (Новосибирск,

1990, 1992); Workshop "Phase transitions in dilute systems"(Bad Honnef, 1995); Международной зимней школе по теоретической физике “Коуровка” (Екатеринбург, 2002); X Всероссийской научно-методической конференции "Телематика 2003"(Санкт-Петербург, 2003); Вторая Сибирская школа-семинар по параллельным вычислениям (Томск,2004); VII Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург,2005); 3rd International Workshop on Simulational Physics (Hangzhou, China, 2006); Семинар по вычислительным технологиям в естественных науках (Таруса, 2009); 25th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2013)20–24 August(Москва, 2013); Международной конференции “Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах” (Махачкала, 2007, Челябинск, 2015); VI Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism» (Красноярск, 2016)

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 45 печатных работ, из них 20 в рецензируемых научных журналах, пять монографий. Получено четыре свидетельства о регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора

Автору диссертационной работы принадлежат выбор направления исследования, постановка задач и формулировка выводов. Автор принимал непосредственное личное участие в получении основных результатов диссертационной работы. В работах, опубликованных в соавторстве, автору принадлежат результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах. Личное участие автора в получении изложенных в диссертации результатов подтверждено соавторами и отражено в совместных публикациях. Личный вклад автора также заключается в получении большей части методических результатов и в проведении значительной части расчетов, анализе и интерпретации полученных данных и написании статей. Идея алгоритма блочного преобразования для неупорядоченной модели Изинга и гипотеза ступенчатой универсальности неупорядоченной модели Изинга была предложена автором совместно с В.В.

Прудниковым. Более подробно вклад соавторов описывается в каждой главе диссертации.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 7 глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации 201 страницу, в том числе 40 рисунков и 19 таблиц. Список литературы включает 221 наименование.

Краткое содержание диссертации

Во **введении** изложена мотивация исследования и описаны этапы его выполнения; сформулированы цель работы и основные положения, выносимые на защиту; дана краткая характеристика основных разделов диссертации.

В **первой главе** приведены основные аспекты и методы теории критических явлений в структурно неупорядоченных системах.

Во **второй главе** представлены результаты численного исследования критического поведения структурно неупорядоченных магнетиков в широкой области изменения спиновой концентрации. Определены с учетом поправок к скейлингу критические температуры и критические индексы для различных концентраций спинов. Высокие требования, предъявленные в процессе проведенных исследований к условиям моделирования, широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20 - 400$, рассмотренных в процессе исследования, выбранные температуры моделирования, исключительно близкие к критической температуре с $\tau = \frac{T-T_c}{T_c} = 5 \cdot 10^{-4} - 10^{-2}$, и позволяющие выделить асимптотические значения характеристик, высокая статистика, использованная в процессе усреднения термодинамических и корреляционных функций по различным примесным конфигурациям, использование для обработки результатов моделирования методики конечноразмерного скейлинга [46], позволяющей наряду с асимптотическими значениями термодинамических функций получать для них скейлинговые функции. Вычисленные скейлинговые функции и значения критических индексов для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального критического

поведения для трехмерных изинговских магнетиков с различными критическими характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем.

В **третьей главе** представлены результаты компьютерного моделирования методом параллельного отжига низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями. Рассматривается антиферромагнитная модель Изинга с концентрацией спинов $p = 0,5$, соответствующей области сильного неупорядочения. Применение численного метода параллельного отжига для исследования низкотемпературного поведения трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели со случайными магнитными полями наглядно показало, что для слабо неупорядоченных систем реализуется антиферромагнитное упорядоченное состояние, в то время как в области сильного структурного беспорядка эффекты случайных магнитных полей приводят к осуществлению нового фазового состояния системы. Оно характеризуется сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы, с реализацией спин-стекольного основного состояния.

В **четвертой главе** осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной модели Изинга с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси. Рассмотрены системы с размерами 48^3 и 144^3 . Для определения динамического индекса z , характеризующего критическое замедление времени релаксации системы $t_c \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, применен метод Монте-Карло для односпиновой динамики совместно с методом динамической ренорм-группы [47], впервые обобщенный на случай моделирования неупорядоченных систем. Для этого осуществлялась процедура блочного разбиения системы, когда блок b^d соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым ориентацией направлением большинства спинов в блоке. В результате были получены значения динамического индекса z для различных значений концентраций спинов. Для объяснения результатов компьютерного моделирования критической динамики предложена гипотеза ступенчатой универсальности трехмерных структурно неупорядоченных изинговских систем. Согласно предлагаемой гипотезы в структурно неупорядоченной модели Изинга могут наблюдаться пять типов различного критического поведения:

1. критическое поведение чистой системы при $p = 1$;

2. критическое поведение слабо неупорядоченной системы при $p_c^{imp} < p < 1$ с эффектами влияния точечных дефектов;
3. критическое поведение сильно неупорядоченной системы при $p_c < p < p_c^{imp}$ с эффектами влияния протяженной примесной структуры;
4. перколяционное примесное при $p = p_c^{imp}$;
5. перколяционное спиновое при $p = p_c$.

В **пятой главе** представлено теоретико-полевое описание критической динамики неупорядоченных магнетиков. Непосредственно для трехмерной системы вычисляется значение динамического критического индекса в двухпетлевом приближении с применением техники суммирования Паде-Бореля. Проводится сравнение с результатами применения ε -разложения и значениями динамического индекса для чистых систем, вычисленных в трехпетлевом приближении, а также полученных при численном моделировании методами Монте-Карло. Обсуждаются эффекты влияния примеси на критическое поведение двумерных систем.

В **шестой главе** проведено численное исследование влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности $m(t)$ ферромагнитной структурно неупорядоченной системы в критической точке. Выполнено исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния, созданного при температурах много больших критической и характеризуемого поэтому малой корреляционной длиной, в сильно коррелированное состояние при критической температуре. Так же исследовалась релаксация системы при критической температуре из начального низкотемпературного состояния. Для слабо и сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга методом коротковременной динамики определены критические индексы.

В **седьмой главе** представлены результаты численного исследования методами Монте-Карло особенностей влияния дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Изучение релаксационной динамики подобных систем, с одной стороны, проводить значительно легче, чем для таких сложных неупорядоченных систем, как спиновые стекла, а с другой стороны, эти системы на неравновесном этапе критической эволюции демонстрируют аналогичные спиновым стеклам эффекты старения и отклонение предельной вели-

чины флуктуационно-диссипативного отношения от единицы как показателя неравновесности системы. Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения при различных концентрациях спинов подтверждают вывод о существовании различных классов универсальности критического поведения для слабо неупорядоченной и сильно неупорядоченной модели Изинга.

Глава 1

Фазовые переходы второго рода и критические явления

1.1. Теория описания фазовых переходов II рода

Первая универсальная феноменологическая теория фазовых переходов второго рода и критических явлений была предложена Л.Д. Ландау в 1937 г. [48, 49]. Она явилась важным этапом в создании современной теории критических явлений, поскольку позволила в рамках единого подхода описать совокупность фазовых переходов второго рода и критических явлений в различных системах. Ландау удалось выделить общую черту, которая объединяет множество фазовых переходов в казалось бы далеких друг от друга по физическим свойствам материалах – спонтанное нарушение симметрии, для описания которого он ввел фундаментальное понятие современной теории критических явлений *параметр порядка*. Физический смысл этого параметра может быть различным и зависит от природы фазового перехода.

Примерами параметра порядка могут служить: намагниченность при переходе ферромагнетик – парамагнетик; разность плотностей жидкости и пара в окрестности критической точки системы жидкость-пар; волновая функция сверхтекучей компоненты при λ -переходе He^4 в сверхтекучее состояние и т. д. Общим для этих параметров является то, что они равны нулю в высокотемпературной (неупорядоченной) фазе с более высокой симметрией и отличны от нуля в низкотемпературной (упорядоченной) фазе с более низкой симметрией. Ландау постулировал разложимость термодинамического потенциала $\Phi(\phi, T, \dots)$ вблизи температуры фазового перехода в ряд по степеням параметра порядка ϕ с коэффициентами разложения, являющимися аналитическими функциями температуры T и внешних параметров. Явный вид этого ряда, а также число компонент параметра порядка определяются группой симметрии системы в точке фазового перехода [49].

С микроскопической точки зрения теория Ландау представляет некоторое обобщение метода самосогласованного поля, применяемого для описания критического поведения конкретных микроскопических моделей реальных систем – модели Изинга, модели решеточного газа и др. Самый главный и очевидный недостаток этого приближения состоит в том, что оно не учитывает корреляции микроскопических переменных. Теорию Ландау можно обобщить с учетом эф-

фехтов корреляции, если учитывать вклад от степеней свободы, которые соответствуют большим пространственным масштабам и являются определяющими в окрестности критической точки. В этом случае параметр порядка оказывается слабо неоднородной величиной и поэтому может быть представлен как медленно изменяющаяся в пространстве функция $\phi(\mathbf{x})$ с малыми градиентами. В простейшем случае симметрии $O(n)$ это приводит к термодинамическому потенциалу

$$H_{\text{GL}}[\phi] = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (r_0 \phi^2(\mathbf{x}) + (\nabla \phi)^2) + \frac{u_0}{4!} (\phi^2)^2 - h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right], \quad (1.1)$$

где $\phi^2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i^2(\mathbf{x})$, $(\nabla \phi)^2 = \sum_{i=1}^n (\nabla \phi_i)^2$, который называют эффективным гамильтонианом Гинзбурга–Ландау–Вильсона [2, 60, 64]. Здесь d – размерность пространства; $h(\vec{x})$ – внешнее поле, сопряженное параметру порядка; $r_0 = (T - T_c)/T_c$, T_c – критическая температура.

К фазовым переходам второго рода в известном смысле примыкают также фазовые переходы, происходящие в *критической точке*.

Критической называется точка на фазовой плоскости, например, давление – температура для системы жидкость – пар, в которой оканчивается кривая фазового равновесия. Соответствующие ей температура и давление носят названия критической температуры T_c и критического давления P_c . При температурах выше T_c и при давлениях больше P_c не существует различных фаз и тело всегда однородно. Можно сказать, что в критической точке исчезает различие между фазами. Понятие о критической точке было впервые введено Д. И. Менделеевым (1860).

При наличии критической точки между любыми двумя фазовыми состояниями вещества может быть реализован непрерывный переход, при котором ни в один из моментов процесса изменения состояния вещества не происходит расслоения на две фазы – для этого надо изменять состояние вдоль любой кривой, огибающей критическую точку и не пересекающей кривую равновесия фаз. При наличии критической точки становится несколько условным самое понятие о различных фазах и невозможно во всех случаях указать, какие состояния относятся к одной фазе, а какие – к другой. Таким образом, можно говорить о двух фазах только тогда, когда они существуют одновременно, со-

прикасаясь одна с другой, т. е. в точках, лежащих на кривой равновесия.

Критическая точка может существовать только для таких фазовых состояний вещества, различие между которыми имеет исключительно количественный характер. Таковы жидкость и газ, отличающиеся друг от друга большей или меньшей ролью взаимодействия между молекулами. Такие же фазы, как жидкость и твердое тело (кристалл) или различные кристаллические модификации вещества, характеризуются качественными различиями – имеют разную внутреннюю симметрию. Ясно, что элемент симметрии системы может либо быть, либо отсутствовать, он может появиться или исчезнуть с изменением ее состояния мгновенно, скачком, а не постепенно. В каждом состоянии тело будет обладать либо одной, либо другой симметрией, и поэтому всегда можно указать, к которой из двух фаз оно относится. Критическая (концевая) точка для таких фаз не может существовать, и кривая равновесия должна либо уходить на бесконечность, либо пересекаться с кривыми равновесия других фаз.

Оказывается, что переходы первого рода, близкие к критической точке, становятся весьма похожими на фазовые переходы второго рода, а именно: скачки первых производных (плотности, энтропии, т.е. существование скрытой теплоты перехода) становятся малыми, но одновременно возникают аномалии в поведении вторых производных термодинамического потенциала (теплоемкости, сжимаемости и др.), как в случае типичных фазовых переходов второго рода. Это и определяет физическую общность между фазовыми переходами второго рода и критическими явлениями.

1.1.1. Критические показатели (индексы). Соотношения между критическими индексами

При изучении фазовых переходов и критических явлений большое внимание уделяется определению значений совокупности показателей, которые получили название критических и описывают эффективное степенное поведение различных интересующих нас термодинамических и корреляционных функций вблизи температуры фазового перехода (критической точки).

Дадим общее определение критического показателя, описывающего поведение некоторой функции $f(\tau)$ вблизи критической точки, где $\tau \sim (T - T_c)/T_c$ – приведенная температура, характеризующая степень удаления от критиче-

ской температуры. Предположим, что функция $f(\tau)$ положительна и непрерывна для достаточно малых положительных значений τ , а также что существует предел

$$\lambda \sim \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln f(\tau)}{\ln \tau}. \quad (1.2)$$

Предел λ получил название критического показателя степени (или просто критического показателя), связанного с функцией $f(\tau)$. Для краткости можно записать

$$f(\tau) \sim \tau^\lambda, \quad (1.3)$$

чтобы подчеркнуть тот факт, что λ – критический показатель функции $f(\tau)$.

Следует отметить, что выражение для асимптотического поведения термодинамической функции $f(\tau)$ может быть более сложным и включать поправочные слагаемые. Тогда функция (1.3) принимает вид

$$f(\tau) = A\tau^x(1 + B\tau^y), \quad y > 0. \quad (1.4)$$

Может возникнуть справедливый вопрос, почему основное внимание обращается на такую величину, как критический показатель, который дает значительно меньше информации, чем полная запись функции. Ответ на этот вопрос определяется, во-первых, тем экспериментальным фактом, что вблизи критической точки поведение функции, имеющей вид многочлена, определяют главным образом ее ведущие члены. Поэтому графики, полученные в экспериментальных исследованиях при температурах, близких к критической точке, в двойном логарифмическом масштабе имеют вид прямых, а критические показатели определяются из наклона этих прямых. Таким образом, критические показатели всегда измеримы, чего нельзя сказать о всей функции. Вторая причина такого внимания к критическим показателям заключается в том, что известно много соотношений между критическими показателями, которые выводятся из общих термодинамических и статистических положений и поэтому справедливы для любой частной системы.

Существует простая однозначная связь между критическим показателем и поведением рассматриваемой функции вблизи критической точки ($\tau \ll 1$). Если критический показатель λ , определяемый уравнением (1.2), отрицателен, то соответствующая функция $f(\tau)$ вблизи критической точки расходится, стремясь к бесконечности; положительные же значения λ соответствуют функции

$f(\tau)$, обращающейся в этой точке в нуль. Чем меньше λ , тем более резкими изменениями вблизи температуры фазового перехода характеризуется поведение $f(\tau)$, в том смысле, что для отрицательных λ расходимость $f(\tau)$ становится сильнее, а для положительных - $f(\tau)$ стремится к нулю быстрее.

Рассмотрим поведение ряда физических величин вблизи критической точки T_c , которое можно задать определенным набором критических показателей – индексов.

Критический индекс α для теплоемкости:

$$C \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad (1.5)$$

критический индекс β для параметра порядка:

$$\phi \sim |\tau|^\beta, \quad T < T_c, \quad (1.6)$$

критический индекс γ для восприимчивости:

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}, \quad (1.7)$$

критический индекс δ для критической изотермы:

$$\phi(h, T_c) \sim h^{1/\delta}. \quad (1.8)$$

Для описания флуктуаций параметра порядка ϕ вводится критический индекс ν , определяющий температурную зависимость корреляционной длины:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (1.9)$$

и критический индекс η , определяющий закон убывания корреляционной функции с расстоянием x при $T = T_c$,

$$G^{(2)}(\mathbf{x}, T_c) \sim \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}}. \quad (1.10)$$

Теплоемкость (для ряда систем), восприимчивость и корреляционная длина являются при $T = T_c$ расходящимися величинами. Свойства систем при непрерывных фазовых переходах определяются сильными и долгоживущими

флуктуациями параметра порядка. Мерой магнитных флуктуаций является линейный размер $\xi(T)$ характерного магнитного домена – области с сильно коррелированными спинами. При $T \gg T_c$ длина корреляции $\xi(T)$ по порядку величины равна периоду решетки. Поскольку по мере приближения T к T_c сверху корреляционные эффекты в пространственной ориентации спинов усиливаются, $\xi(T)$ будет возрастать при приближении T к T_c .

Предсказываемые теорией Ландау универсальные значения критических индексов

$$\alpha = 0, \quad \beta = 1/2, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3, \quad \nu = 1/2, \quad \eta = 0 \quad (1.11)$$

значительно отличаются от наблюдаемых.

1.1.2. Гипотеза подобия

Задолго до появления первых экспериментальных данных, не согласующихся с теорией Ландау, Л. Онсагер опубликовал работу [50] (1944 г.), посвященную исследованию поведения намагниченности и теплоемкости двумерного ферромагнетика в нулевом внешнем поле (точно решаемая задача), результаты которой оказались в неожиданном противоречии с результатами классической теории. Исследователи, естественно, понимали, что роль крупномасштабных флуктуаций по мере приближения к критической точке должна возрастать. Уже в середине 20-х годов была опубликована известная работа Орнштейна-Цернике, на основе которой удалось объяснить многие особенности явления критической опалесценции, имеющего ярко выраженную флуктуационную природу. Флуктуационные явления изучались в рамках феноменологического подхода в работах Сцилларда, Мандельштама, Леонтовича и др. Но сама идея об определяющей роли флуктуаций для всей проблематики фазовых превращений окончательно оформилась лишь к середине 60-х годов. Это было связано в первую очередь с прогрессом в области экспериментальных исследований фазовых переходов, убедительно продемонстрировавших расхождение реального критического поведения с предсказаниями теории Ландау.

Оказалось, что для пространственной размерности системы $d < 4$ взаимодействия флуктуаций оказываются эффективно очень сильными и, напротив,

при $d > 4$ флуктуационные эффекты не существенны, и значения критических индексов определяются теорией Ландау. В то же время обнаруженный исследователями универсальный характер поведения различных систем во флуктуационной области навел их на мысль о том, что он является следствием некоторой фундаментальной симметрии системы в критической точке и что ее выявление и исследование даст возможность определить универсальные характеристики поведения данных систем – критические индексы.

На первом этапе исследований влияние флуктуаций удалось феноменологически описать с помощью гипотезы подобия (масштабной инвариантности), концепция которой была выработана в работах В.Л. Покровского и А.З. Паташинского [51–53], В. Видома [54], Л.П. Каданова [55, 56], положивших начало современной флуктуационной теории критических явлений.

Суть этой концепции составляет предположение о том, что в окрестности критической точки сингулярная зависимость физических величин от $T - T_c$ осуществляется только через их зависимость от корреляционной длины ξ , которая расходится при $T \rightarrow T_c$. Это приводит к тому, что в окрестности критической точки имеется только один существенный параметр длины – ξ , остальные же микроскопические размеры, например $\Lambda^{-1} \sim a$ – период решетки, не влияют на характер особенностей термодинамического потенциала, а значит, и на значения критических индексов.

Многие экспериментальные и теоретические работы, посвященные изучению критических явлений, подтверждают существование неравенств между показателями, и более того, переход их во многих случаях в равенства:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (1.12)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2, \quad (1.13)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (1.14)$$

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

$$\nu d = 2 - \alpha, \quad (1.16)$$

из которых видно, что независимыми являются только два индекса, вычисление которых – одна из главных проблем теории критических явлений.

В теории критических явлений существует статический закон подобия, или приближение обобщенной однородности термодинамических функций, ко-

торый включает в себя простое предположение об основном виде термодинамического потенциала. Предсказания гипотезы подобия приводят к функциональным соотношениям между показателями в критической точке, при этом число независимых показателей в этой точке оказывается ограниченным. Кроме предсказания о существовании ряда равенств, связывающих критические показатели, гипотеза подобия дает возможность предсказывать вид уравнения состояния. Предсказания статистической гипотезы подобия подтверждаются множеством экспериментальных работ.

Однородные функции

Функция $f(r)$ по определению будет однородной, если для всех значений параметров λ

$$f(r) = g(\lambda)f(\lambda r), \quad (1.17)$$

где функция $g(\lambda)$ не конкретизирована. Простой пример однородной функции – парабола

$$f(r) = Br^2, \quad (1.18)$$

для которой

$$f(\lambda r) = B(\lambda r)^2 = \lambda^2 Br^2 = \lambda^2 f(r), \quad (1.19)$$

и поэтому $g(\lambda) = \lambda^2$.

Однородная функция $f(r)$ обладает следующим свойством. Если известны ее значение в одной точке $r = r_0$ и функциональный вид $g(\lambda)$, то можно найти значение функции в любой точке. Это следует из того, что каждое значение r можно записать в форме λr_0 и

$$f(r) = g(\lambda)f(\lambda r_0). \quad (1.20)$$

Равенство (1.20) показывает, что значение функции $f(r)$ в любой точке получается из значения $f(r)$ в выбранной точке $r = r_0$ простым изменением масштаба. В общем случае изменение масштаба нелинейно.

Функция подобия $g(\lambda)$ в уравнении (1.17) не является произвольной. Действительно, она должна иметь вид

$$g(\lambda) = \lambda^p, \quad (1.21)$$

где параметр p обычно называют показателем однородности.

Докажем, что $g(\lambda)$ должна иметь степенной вид. Предположим, что производится изменение масштаба сначала в μ , а затем в λ раз. Уравнение (1.17) дает

$$f\{\lambda(\mu r)\} = g(\lambda)f(\mu r) = g(\lambda)g(\mu)f(r). \quad (1.22)$$

Точно такой же результат можно получить и однократным изменением масштаба:

$$f\{(\lambda\mu)r\} = g(\lambda\mu)f(r). \quad (1.23)$$

Тогда на функцию $g(\lambda)$ накладывается условие

$$g(\lambda\mu) = g(\lambda)g(\mu). \quad (1.24)$$

Если ввести дополнительное условие дифференцируемости функции g , то $g(\lambda)$ имеет степенной вид. Дифференцируя обе стороны уравнения (1.24) по μ , получаем

$$\frac{\partial}{\partial \mu} g(\lambda\mu) = \lambda g'(\lambda\mu) = g(\lambda)g'(\mu). \quad (1.25)$$

Полагая, что $\mu = 1$ и $g'(\mu)|_{\mu=1} \equiv p$, получаем

$$\frac{g'(\lambda\mu)}{g'(\lambda)} = \frac{g'(\mu)}{\lambda} = \frac{p}{\lambda}, \quad (1.26)$$

$$\frac{g'(\lambda\mu)}{g'(\lambda)} = \frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} = \frac{d}{d\lambda} \ln g(\lambda), \quad (1.27)$$

откуда находим

$$\ln g(\lambda) = p \ln \lambda + c, \quad (1.28)$$

или

$$g(\lambda) = e^c \lambda^p. \quad (1.29)$$

Тогда

$$g'(\lambda) = p e^c \lambda^{p-1}.$$

По определению $g'(\lambda)|_{\lambda=1} \equiv p$. Значит, постоянная интегрирования c равна нулю и

$$g(\lambda) = \lambda^p. \quad (1.30)$$

Обобщенные однородные функции

Введем понятие обобщенной однородной функции

$$f(\lambda^{a_x} x, \lambda^{a_y} y, \dots) = \lambda f(x, y, \dots), \quad (1.31)$$

где a_x, a_y, \dots – размерные показатели переменных x, y, \dots .

Это уравнение можно записать также в виде

$$f(\lambda^{a_x} x, \lambda^{a_y} y, \dots) = \lambda^p f(x, y, \dots), \quad (1.32)$$

т.е. функция $f(x, y, \dots)$, удовлетворяющая уравнению (1.32), удовлетворяет и уравнению

$$f(\lambda^{a_x/p} x, \lambda^{a_y/p} y, \dots) = \lambda f(x, y, \dots). \quad (1.33)$$

Справедливо и обратное утверждение.

Рассмотрим свойства однородной функции на примере ее зависимости от двух переменных

$$f(\lambda x, \lambda y) = \lambda f(x, y). \quad (1.34)$$

Поскольку уравнение применимо для любых значений параметра λ , оно должно выполняться и в случае специального выбора значения $\lambda = 1/y$.

$$f(x/y, 1) = y^{-p} f(x, y). \quad (1.35)$$

Функция $f(x/y, 1)$, стоящая в левой части уравнения, формально является функцией двух переменных, однако вторая переменная имеет фиксированное значение, равное единице. Поэтому можно считать ее функцией одной переменной и определить как

$$f(x, y) = y^p f(x/y, 1) \equiv y^p F(x/y). \quad (1.36)$$

Таким образом, если функция $f(x, y)$ однородна, то ее можно записать в виде произведения y^p на функцию от x/y . Верно и обратное утверждение: если функция удовлетворяет условию (1.36), то она удовлетворяет и условию (1.34), т.е. является однородной.

Аналогичным образом можно показать, что если функция $f(x, y)$ одно-

родная, эквивалентной формой уравнения (1.36) будет

$$f(x, y) = x^p F(y/x). \quad (1.37)$$

Для однородной функции вида $f(\lambda x, \lambda^{a_y} y)$ можно выбрать $\lambda^{a_y} = 1/y$, тогда функцию можно переписать в виде

$$f(x, y) = y^{1/a_y} F(x/y^{1/a_y}). \quad (1.38)$$

Статическая гипотеза подобия

В данном подразделе будет сформулирована статическая гипотеза подобия. Остановимся на ней для потенциала Гиббса $\Phi(T, H)$ магнитной системы. Запишем

$$\Phi(T, H) \rightarrow \Phi(\tau, H), \quad (1.39)$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$ – приведенная температура, и предположим, что все несингулярные члены в функции $\Phi(\tau, H)$ можно опустить.

Статическая гипотеза подобия утверждает, что потенциал Гиббса $\Phi(\tau, H)$ является обобщенной однородной функцией. Тогда, согласно общему определению (1.31), это утверждение эквивалентно требованию существования двух параметров, обозначаемых a_τ и a_H , при которых

$$\Phi(\lambda^{a_\tau} \tau, \lambda^{a_H} H) = \lambda \Phi(\tau, H) \quad (1.40)$$

для любого значения числа λ . Важно подчеркнуть, что гипотеза подобия не позволяет вычислить параметры a_τ и a_H . Ниже будет показано, что все показатели в критической точке могут быть выражены через a_τ и a_H . Таким образом, если бы можно было в рамках теории подобия определить a_τ и a_H , то сразу были бы найдены все показатели в критической точке. Вместе с тем тот факт, что все критические показатели можно выразить всего через два параметра подобия a_τ и a_H , означает: если два критических показателя известны, то все остальные можно выразить через них.

Можно показать, что если $\Phi(\tau, H)$ – обобщенная однородная функция, то другие три термодинамических потенциала $F(\tau, M)$, $E(S, M)$, $H(S, H)$ – также обобщенные однородные функции. Потенциал Гиббса выбран нами потому,

что критические показатели проще всего получить при использовании этого потенциала.

Продифференцируем обе части равенства (1.40) по H

$$\lambda^{a_H} H \frac{\partial \Phi(\lambda^{a_\tau} \tau, \lambda^{a_H} H)}{\partial H} = \lambda \frac{\partial \Phi(\tau, H)}{\partial H}. \quad (1.41)$$

Поскольку производная от потенциала Гиббса по полю есть намагниченность с обратным знаком, то выражение (1.41) эквивалентно равенству

$$\lambda^{a_H} M(\lambda^{a_\tau} \tau, \lambda^{a_H} H) = \lambda M(\tau, H). \quad (1.42)$$

С поведением намагниченности вблизи критической точки связано два критических показателя. Показатель β описывает ее поведение при $H = 0$ и $\tau \rightarrow 0$, в то время как показатель $1/\delta$ соответствует $\tau = 0$ и $H \rightarrow 0$.

Рассмотрим сначала случай $H = 0$, для которого (1.42) принимает вид

$$M(\tau, 0) = \lambda^{a_H - 1} M(\lambda^{a_\tau} \tau, 0). \quad (1.43)$$

Поскольку уравнение (1.43) применимо для всех значений λ , оно должно выполняться и для частного значения

$$\lambda = \left(-\frac{1}{\tau} \right)^{1/a_\tau}, \quad (1.44)$$

откуда находим

$$M(\tau, 0) = (-\tau)^{(1-a_H)/a_\tau} M(-1, 0). \quad (1.45)$$

Однако при $\tau \rightarrow 0^-$ из (1.6) следует, что

$$M(\tau, 0) \sim (-\tau)^\beta. \quad (1.46)$$

В результате получаем

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_\tau}. \quad (1.47)$$

Выражение (1.47) определяет показатель β в критической точке через неизвестные параметры подобия a_τ и a_H . Показатель δ также можно выразить через параметры подобия, если положить $\tau = 0$ в уравнении (1.42) и $H \rightarrow 0$,

что дает

$$M(0, H) = \lambda^{a_H-1} M(0, \lambda^{a_H} H). \quad (1.48)$$

Если задать

$$\lambda = H^{-1/a_H}, \quad (1.49)$$

то уравнение (1.48) примет вид

$$M(0, H) = H^{(1-a_H)/a_H} M(0, 1). \quad (1.50)$$

При $H \rightarrow 0$, согласно (1.8),

$$M(0, H) \sim H^{1/\delta}, \quad (1.51)$$

откуда находим

$$\delta = \frac{a_H}{1 - a_H}. \quad (1.52)$$

Уравнения (1.47) и (1.52) можно решать совместно относительно параметров подобия a_τ и a_H , в результате чего получим

$$a_\tau = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\delta + 1}, \quad (1.53)$$

и

$$a_H = \delta \frac{1}{\delta + 1}. \quad (1.54)$$

Вычисляя другие частные производные от потенциала Гиббса, можно найти выражения для других показателей. Например, дифференцируя дважды по H , получаем

$$\lambda^{2a_H} \chi_T(\lambda^{a_\tau} \tau, \lambda^{a_H} H) = \lambda \chi_T(\tau, H). \quad (1.55)$$

Здесь было использовано выражение для изотермической восприимчивости χ_T через потенциал Гиббса

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial H^2} \right)_T. \quad (1.56)$$

Рассматривая случай $H = 0$ и выбирая $\lambda = (-\tau)^{-1/a_\tau}$, запишем (1.55) в виде

$$\chi_T(\tau, 0) = (-\tau)^{-(2a_H-1)/a_\tau} \chi_T(-1, 0). \quad (1.57)$$

Если $\tau \rightarrow 0^-$, то из уравнения (1.7) следует

$$\chi_T(\tau, 0) \sim (-\tau)^{-\gamma'}, \quad (1.58)$$

и мы находим

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_\tau}. \quad (1.59)$$

Так как неизвестных параметров подобия только два, можно ожидать, что показатель γ' будет зависеть от β и δ . Сопоставляя (1.47), (1.52) и (1.59), получаем соотношение

$$\gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (1.60)$$

которое известно как *равенство Уидома*.

Если задать в уравнении (1.55)

$$\lambda = \tau^{-1/a_\tau},$$

это приведет к формуле

$$\gamma = \frac{2a_H - 1}{a_\tau}. \quad (1.61)$$

Сравнивая (1.59) и (1.61), получаем

$$\gamma' = \gamma. \quad (1.62)$$

Равенство критических показателей со штрихами ($T < T_c$) и без штрихов ($T > T_c$) является вторым *критерием справедливости статической гипотезы подобия*.

Если продифференцировать потенциал Гиббса по температуре, с учетом выражения для теплоемкости C_H

$$C_H \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = -T \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} \right)_H,$$

то получаем

$$\lambda^{2a_\tau} C_H(\lambda^{a_\tau} \tau, \lambda^{a_H} H) = \lambda C_H(\tau, H). \quad (1.63)$$

Полагая $H = 0$ и $\lambda = (-\tau)^{-1/a_\tau}$, находим

$$\alpha' = 2 - \frac{1}{a_\tau}. \quad (1.64)$$

Объединяя (1.64) и (1.53), получаем неравенство Гриффитса в виде равенства

$$\alpha' + \beta(\delta + 1) = 2; \quad (1.65)$$

объединяя (1.65) и (1.59), получаем неравенство Рашбура в виде равенства

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2. \quad (1.66)$$

Гипотеза подобия дает механизм представления показателей в критической точке через параметры подобия a_τ и a_H , и, исключая эти два параметра, можно получить всю совокупность соотношений между показателями (таблица 1.1). Эти соотношения не являются независимыми, т.е., зная любые два показателя, можно определить все остальные.

Таблица 1.1 Соотношения между критическими показателями, вытекающие из гипотезы подобия

$\alpha + 2\beta + \gamma = 2,$	$\gamma = \beta(\delta - 1),$
$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2,$	$\gamma = \gamma',$
$(2 - \alpha)\zeta + 1 = (1 - \alpha)\delta,$	$\alpha = \alpha',$
$(2 - \alpha)(\delta - 1) = \gamma(\delta + 1),$	$\delta = \frac{2 - \alpha + \gamma}{2 - \alpha - \gamma}.$

1.1.3. Метод ренормгруппы и ε -разложения

Метод ренормгруппы, предложенный К. Вильсоном для описания критических явлений [2, 57–59], будучи непосредственно связанным с картиной масштабной инвариантности флуктуаций, позволяет последовательно вычислять значения критических индексов, используя разложение по специфическому малому параметру $\varepsilon = 4 - d$. Основная идея метода заключается в последовательном исключении большого числа коротковолновых степеней свободы.

Так, ренормализационное преобразование гамильтониана системы $H[\phi, \Lambda]$ определяется реализацией двух последовательных этапов. На первом этапе исключается зависимость H от коротковолновых гармоник $\phi_{\mathbf{q}}$ с волновыми векторами $\Lambda/b \leq q \leq \Lambda$ и $b > 1$; «сглаженный» таким образом гамильтониан \tilde{H} приводит к исходной статистической сумме и корреляционным функциям, если рассматривать последние при значениях аргументов, соответствующих достаточно большому масштабам. На втором этапе гамильтониан подвергается действию масштабного преобразования, восстанавливающего прежнее значение параметра обрезания Λ , задающего интервал изменения волновых векторов. Совокупность этих двух преобразований гамильтониана задает ренормализационное преобразование. В результате применения ренормализационного преобразования ренормированные гамильтонианы описывают флуктуации нового поля $\phi'_{\mathbf{q}}$ в исходной области волновых векторов.

Начав с некоторого затравочного гамильтониана $H[\phi, \Lambda]$ и многократно применяя к нему процедуру перенормировки, можно получить последовательность гамильтонианов, которую называют ренормгрупповой траекторией исходного гамильтониана, описываемой им в пространстве своих параметров. Предельные свойства этих последовательностей (траекторий) непосредственно связаны с критическим поведением системы. Применение процедуры перенормировки к гамильтониану системы, не находящейся в критической точке, приводит его к достаточно большим пространственным масштабам, на которых флуктуации параметра порядка будут описываться термодинамической теорией флуктуаций.

Поскольку в окрестности критической точки флуктуации в системе достаточно сильно развиты, величину их взаимодействия нельзя использовать в качестве малого параметра. Однако для систем с $d \geq 4$ взаимодействие флуктуаций не сказывается на значениях критических индексов. Это позволяет построить специфическую теорию возмущений с малым параметром $\varepsilon = 4 - d$ – отклонением размерности системы от размерности, равной 4. Несмотря на то, что при $d = 3$, $\varepsilon = 1$ – не мало, модельные расчеты в первых порядках по ε дают результаты, находящиеся в хорошем согласии с экспериментальными данными. К сожалению, поправки более высокого порядка уводят результат от точных значений. Это объясняется тем, что как во всякой теории возмущений ряды по ε являются асимптотическими.

В теориях, подобных квантовой электродинамике, где параметр разложения достаточно мал, это обстоятельство может привести к ухудшению результатов лишь при учете поправок очень высокого порядка. В моделях же с сильной связью, к которым относится и теория критических явлений, значительная величина параметра разложения приводит к тому, что попытки непосредственно учесть поправки к первому приближению могут только ухудшить результат. В каком-то смысле выходом из этой ситуации является применение специальных методов суммирования асимптотических рядов [61–63].

Рассмотрим реализацию метода ренормгруппы на примере модели, известной в квантовой теории поля как модель ϕ^4 и применяемой в теории фазовых переходов для описания критических свойств изотропных систем [1, 2, 64]. Гамильтониан модели задается выражением

$$H = \int d^d x \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha} [r\phi_{\alpha}^2 + (\nabla\phi_{\alpha})^2] + u \sum_{\alpha,\beta} \phi^{\alpha}\phi^{\alpha}\phi^{\beta}\phi^{\beta} \right). \quad (1.67)$$

В импульсном представлении гамильтониан принимает вид

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} (q^2 + r) \phi_q^{\alpha} \phi_{-q}^{\alpha} + \\ &+ u \sum_{\alpha,\beta} \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \cdots \frac{dq_4}{(2\pi)^d} \delta(q_1 + q_2 + q_3 + q_4) \phi_{q_1}^{\alpha} \phi_{q_2}^{\alpha} \phi_{q_3}^{\beta} \phi_{q_4}^{\beta}. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Интегрирование ведется по волновым векторам (импульсам) в пределах $0 < |q^{\alpha}| < \Lambda$, где Λ - импульс обрезания. Значение Λ должно быть меньше максимального значения импульса, равного $1/a$, где a - параметр решетки.

Проблема фазового перехода сводится к анализу статистической суммы

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(-H), \quad (1.69)$$

которая является континуальным интегралом по всем значениям параметра порядка ϕ_q^{α} от $-\infty$ до ∞ с элементом объема $\mathcal{D}\phi = \prod_{0 < |q^{\alpha}| < \Lambda} \prod d\phi_q^{\alpha}$.

Основная идея метода ренормгруппы состоит в том, чтобы выражение для вероятности $\exp(-H)$ проинтегрировать по коротковолновым флуктуациям параметра порядка и получить эффективный гамильтониан для длинноволновых

флуктуаций. Этот гамильтониан определяется из соотношения

$$\exp(-H'[\phi_0]) = \int \mathcal{D}\phi_1 \exp(-H[\phi_0 + \phi_1]) \quad (1.70)$$

с параметром порядка ϕ , представленным в виде суммы длинноволновых ϕ_0 и коротковолновых ϕ_1 флуктуаций: $\phi_q^\alpha = \phi_{0q}^\alpha + \phi_{1q}^\alpha$, где

$$\begin{aligned} \phi_q^\alpha &= \phi_{0q}^\alpha, & 0 < q < \Lambda/b, \\ \phi_q^\alpha &= \phi_{1q}^\alpha, & \Lambda/b < q < \Lambda, \end{aligned} \quad (1.71)$$

$b > 1$ – произвольный параметр. Полная статистическая сумма принимает при этом следующий вид :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_0 \dots \int \mathcal{D}\phi_1 \exp(-H[\phi_0 + \phi_1]). \quad (1.72)$$

Определим конкретный вид эффективного гамильтониана H' . Для этого применим теорию возмущений, осуществляя разложение подынтегрального выражения в (1.70) в ряд по степеням гамильтониана H_{int} , задающего взаимодействие флуктуаций, и считая формально параметр взаимодействия u малым. Поскольку H_0 аддитивно, т.е. $H_0[\phi_0 + \phi_1] = H_0[\phi_0] + H_0[\phi_1]$, соотношение (1.70) можно переписать в виде:

$$\exp(-H'[\phi_0]) = \exp(-H_0[\phi_0]) \int \mathcal{D}\phi_1 \exp\{-H[\phi_1] - H_{int}[\phi_0 + \phi_1]\}. \quad (1.73)$$

Задача вычисления правой части сводится к вычислению гауссовых континуальных интегралов от произведения величин ϕ_{1q}^α , возникающих в каждом члене разложения $\exp(-H_{int})$ и наиболее удобно представляемых графически в виде ряда диаграмм Фейнмана [2]. Обозначим через $\exp(-S[\phi_0])$ результат интегрирования членов ряда разложения $\exp(-H_{int})$ в (1.73) при выделении в сумме ряда в соответствии с теоремой о связности лишь вкладов от связанных диаграмм. Тогда с точностью до несущественной константы получается выражение для эффективного гамильтониана

$$H'[\phi_0] = H_0[\phi_0] + S[\phi_0], \quad (1.74)$$

где выражение $S[\phi_0]$, определяющее перенормировку параметров затравочного гамильтониана $H_0[\phi_0]$, может быть задано следующим соотношением [65]:

$$\begin{aligned}
S[\phi] &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} \phi_{0q}^{\alpha} \phi_{0-q}^{\alpha} \left[4(n+2)u \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q_1^2 + r)} - \right. \\
&- 32(n+2)u^2 \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \frac{dq_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q_1^2 + r)} \frac{1}{(q_2^2 + r)} \times \\
&\times \left. \frac{1}{((q + q_1 + q_2)^2 + r)} + \dots \right] + \frac{1}{3} \sum_{\alpha} I_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} \times \\
&\times \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \dots \frac{dq_4}{(2\pi)^d} \delta(q_1 + \dots + q_4) \phi_{q_1}^{\alpha_1} \phi_{q_2}^{\alpha_2} \phi_{q_3}^{\alpha_3} \phi_{q_4}^{\alpha_4} \left[u - \right. \\
&- 4(n+8)u^2 \int \frac{dq}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} + 16(n^2 + 6n + 20)u^3 \times \\
&\times \int \frac{dqdq'}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{(q^2 + r)} \frac{1}{(q'^2 + r)} + 64(5n + 22)u^3 \times \\
&\times \left. \int \frac{dqdq'}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{(q^2 + r)} \frac{1}{(q'^2 + r)} \frac{1}{((q - q')^2 + r)} + \dots \right]. \tag{1.75}
\end{aligned}$$

В данном выражении слагаемые при $\phi_{0q}^{\alpha} \phi_{0-q}^{\alpha}$ определяют перенормировку собственной энергии длинноволновых флуктуаций, а слагаемые при четвертой степени ϕ_{0q} – перенормировку энергии взаимодействия этих флуктуаций за счет вклада коротковолновых флуктуаций. Интегрирование в (1.75) по промежуточным волновым векторам (q_1 и q_2 в первой квадратной скобке, q и q' во второй квадратной скобке) ведется в интервале $\Lambda/b < |q^{\alpha}| < \Lambda$. Интегралы такого типа по d -мерному пространству волновых векторов вычисляются с помощью соотношения:

$$\int dq f(q^2) = K_d \int q^{d-1} f(q^2) dq,$$

где $K_d = [2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(d/2)]^{-1}$ – поверхность d -мерной сферы единичного радиуса.

Эффективному гамильтониану (1.74) можно придать форму исходного за-

травочного гамильтониана (1.67), если осуществить масштабное преобразование для волновых векторов и флуктуационных полей ϕ_q^α параметра порядка:

$$q \rightarrow q/b, \quad \phi_{0q}^\alpha \rightarrow \xi \phi_{0q}^\alpha. \quad (1.76)$$

В результате данного преобразования значения волновых векторов в эффективном гамильтониане будут изменяться в прежнем интервале $0 < |q^\alpha| < \Lambda$, поэтому эффективный гамильтониан $H'[\phi]$, определяемый формулами (1.74) и (1.75), запишется в виде

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} (q^2 + r') \phi_q^\alpha \phi_{-q}^\alpha + \\ &+ u' \sum_{\alpha, \beta} \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \cdots \frac{dq_4}{(2\pi)^d} \delta(q_1 + q_2 + q_3 + q_4) \phi_{q_1}^{\alpha_1} \phi_{q_2}^{\alpha_2} \phi_{q_3}^{\alpha_3} \phi_{q_4}^{\alpha_4}. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Преобразования (1.76) называются преобразованиями Каданова. Они соответствуют идее перехода от исходной решетки спинов к укрупненным блокам с эффективными спинами [55, 56]. Связь параметров эффективного гамильтониана r' и u' с параметрами r и u исходного гамильтониана определяется следующими ренормализационными уравнениями:

$$\begin{aligned} r' &= b^{2-\eta} [r + 4(n+2)uA(r) - 32(n+2)u^2D(r) + \dots], \\ u' &= b^{\varepsilon-2\eta} [u - 4(n+8)u^2K_4 \ln b + 16(n^2 + 6n + 20)u^3K_4^2 \ln^2 b + \\ &+ 64(5n+22)u^3 \frac{1}{2}K_4^2(1 + \ln b) \ln b + \dots], \end{aligned} \quad (1.78)$$

где $\varepsilon = 4 - d$ и было использовано соотношение $\xi = b^{(d+2-\eta)/2}$, в котором $\eta = 8(n+2)K_4u^2$ – критический индекс Фишера, отвечающее требованию, чтобы член с q^2 в перенормированном гамильтониане (1.77) имел такой же вид, как и в исходном. При этом предполагалось, что $\varepsilon \ll 1$ и при получении выражений (1.78) интегрирование в (1.75) по волновым векторам проводилось при использовании этого приближения; $A(r) = K_4[\Lambda^2(1 - b^{-2})/2 - r \ln b]$.

Переход от исходного гамильтониана H к эффективному H' можно описать с помощью некоторого оператора R , действие которого можно повторить

и получить новые гамильтонианы H'' , H''' и т. д.:

$$\begin{aligned} H' &= RH, \\ H'' &= RH' = R^2H. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Операторы R , R^2 , R^3 образуют так называемую ренормализационную группу (ренормгруппу). Точнее было бы назвать ренормгруппу полугруппой, поскольку не существует обратный элемент R^{-1} . Изменение параметров гамильтониана при однократном действии оператора R описывается уравнениями ренормгруппы (1.78).

Возможность фазового перехода связывается с существованием неподвижных (фиксированных) точек ренормгруппового преобразования. Фиксированными называются такие точки в фазовом пространстве параметров гамильтониана, в которых заканчиваются ренормгрупповые траектории изменения значений параметров и никакие другие траектории из которых не выходят. Неподвижные точки находятся из уравнения

$$H^* = RH^*. \quad (1.80)$$

Скорость приближения фазовых траекторий к фиксированной точке определяет критический индекс корреляционной длины ν . В частности, для фиксированной точки (r^*, u^*) модели ϕ^4 уравнения принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} r^* &= b^{2-\eta} [r^* + 4(n+2)u^*A(r^*) - 32(n+2)u^{*2}D(r^*) + \dots], \\ u^* &= b^{\varepsilon-2\eta} [u^* - 4(n+8)u^{*2}K_4 \ln b + 16(n^2 + 6n + 20)u^{*3}K_4^2 \ln^2 b + \\ &\quad + 64(5n+22)u^{*3}\frac{1}{2}K_4^2(1 + \ln b) \ln b + \dots]. \end{aligned} \quad (1.81)$$

При этом $b^{2-\eta}$ и $b^{\varepsilon-2\eta}$ необходимо разложить в ряд Тейлора по малым ε и $\eta = 0(\varepsilon^2)$. Решая эти уравнения, находим в первом порядке по ε :

$$r^* = -\varepsilon \frac{(n+2)}{2(n+8)} \Lambda^2, \quad u^* = \frac{\varepsilon}{4K_4(n+8)}. \quad (1.82)$$

Во втором порядке по ε координата u^* неподвижной точки характеризуется

следующим выражением:

$$u^* = \varepsilon \frac{\Lambda^\varepsilon}{4K_4(n+8)} \left(1 + \frac{3(3n+14)}{(n+8)^3} \varepsilon + \dots \right). \quad (1.83)$$

Кроме этой неподвижной точки, называемой изотропной гейзенберговской, существует тривиальное решение уравнений (1.81): $u^* = r^* = 0$. Это решение описывает случай несущественного взаимодействия флуктуаций параметра порядка при описании фазовых переходов и соответствует области применимости теории Ландау.

Далее необходимо исследовать полученные неподвижные точки на устойчивость относительно малых отклонений от их значений, что позволяет определить реализуемый в системе тип фазового перехода. С неустойчивыми неподвижными точками связывают фазовые переходы первого рода, в то время как устойчивым неподвижным точкам ставится в соответствие фазовый переход второго рода.

Для исследования вопроса о стабильности изотропной неподвижной точки линеаризуем рекуррентные соотношения (1.78) в окрестности этой точки. Линеаризованные уравнения после процедуры диагонализации матрицы преобразования можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Delta r' &= b^{\lambda_r} \Delta r, \\ \Delta u' &= b^{\lambda_u} \Delta u, \end{aligned} \quad (1.84)$$

где $\Delta r = r - r^*$, $\Delta r' = r' - r^*$, $\Delta u = u - u^*$ и $\Delta u' = u' - u^*$. Величины λ_r и λ_u определяются из соотношений

$$\begin{aligned} b^{\lambda_r} &\equiv b^2 \left(1 - \varepsilon \ln b \frac{(n+2)}{(n+8)} \right), \\ b^{\lambda_u} &\equiv 1 - \varepsilon \ln b, \end{aligned}$$

откуда в первом порядке по ε имеем

$$\begin{aligned} \lambda_r &= 2 - \varepsilon \frac{(n+2)}{(n+8)}, \\ \lambda_u &= -\varepsilon. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Отрицательное значение λ_u означает, что при многократном преобразовании гамильтониана $\Delta u' \rightarrow 0$, т. е. параметр эффективного взаимодействия стремится к своему значению u^* в неподвижной точке. Изотропная точка является, таким образом, стабильной. Что касается первого уравнения (1.84) ренормгруппы, оно показывает расходимость величины $\Delta r'$ под действием преобразований ренормгруппы, так как $b > 1$ и $\lambda_r > 0$. Согласно аргументам Вильсона [2, 57], это связано с расходимостью корреляционной длины в точке фазового перехода T_c . Величина λ_r определяет критический индекс ν корреляционной длины посредством соотношения

$$\lambda_r = \frac{1}{\nu}. \quad (1.86)$$

Естественно, что он не зависит от произвольно выбранного параметра b .

С помощью выражения для λ_r находим ν в первом порядке по ε :

$$\nu = \frac{1}{2} + \varepsilon \frac{(n+2)}{4(n+8)} + \dots \quad (1.87)$$

Критический индекс Фишера η равен нулю в этом приближении. Его значения могут быть найдены во втором порядке по ε . Так, значения индексов во втором порядке по ε соответствуют следующим выражениям:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{1}{2} + \varepsilon \frac{(n+2)}{4(n+8)} + \varepsilon^2 \frac{(n+2)(n^2+23n+20)}{8(n+8)^2}, \\ \eta &= \varepsilon^2 \frac{(n+2)}{2(n+8)^2}. \end{aligned} \quad (1.88)$$

Формулы (1.88) показывают, что критические индексы зависят лишь от числа компонент параметра порядка и размерности пространства и совершенно не зависят от величины затравочного взаимодействия. Это и подтверждает *универсальный характер критического поведения*.

Исследования модели показали, что условие устойчивости нетривиальной неподвижной точки $\lambda_u = -\varepsilon < 0$ сводится к требованию положительности параметра $\varepsilon = 4 - d$, т. е. $d < 4$, в то время как для тривиальной гауссовой неподвижной точки условие устойчивости $\lambda_u = \varepsilon < 0$ оказывается обратным, т. е. $d > 4$. Таким образом, фазовые переходы в трехмерных и двумерных изотропных системах, описываемых моделью ϕ^4 , характеризуются нетривиальной

неподвижной точкой, что указывает на существенную роль флуктуаций параметра порядка в реализации в них фазового перехода второго рода. Областью применимости результатов теории Ландау оказываются фазовые переходы в системах с размерностью больше четырех. В тривиальной гауссовой неподвижной точке значения критических индексов $\nu = 1/2$, $\eta = 0$ соответствуют теории Ландау.

Нет необходимости вычислять значения остальных критических индексов, так как они могут быть получены из равенств соотношений подобия, связывающих критические индексы (см. таблицу 1.1).

1.2. Влияние дефектов структуры на критическое поведение

В реальных макроскопических системах всегда присутствуют те или иные дефекты. Дефекты структуры могут иметь различную природу и оказывать различное влияние на процессы, протекающие в твердых телах. Поэтому описание влияния дефектов структуры во всех возможных формах их проявления является одной из интересных и сложных проблем теории критических явлений. Так в ферромагнитном кристалле часть ячеек может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент. Если концентрация немагнитных атомов превышает определенную величину, ферромагнетизм полностью подавляется. Другим примером служит ситуация, когда в решетке возможны дефекты, приводящие к случайно распределенным выделенным направлениям ориентации спинов. В качестве еще одного примера можно упомянуть переход жидкого He^4 в сверхтекучее состояние в пористой среде.

Теоретическое изучение влияния случайно распределенных дефектов и примесей на различные явления началось много лет назад. Движение электронов в неупорядоченных твердых телах, перколяционная задача, модель Изинга со спинами на случайных узлах и другие подобные задачи привлекали к себе многих исследователей, результаты которых отражены в работах [67, 69, 70].

Причина, по которой влияние дефектов структуры на критическое поведение должно быть существенным, состоит в следующем. Допустим, что в системе, находящуюся вблизи критической точки, ввели малое количество примесей или разорвали в ней небольшое число связей. Такое изменение можно рассматривать как включение малого возмущения. Отклик системы на такое возмуще-

ние описывается на языке поведения различных восприимчивостей и корреляционных функций. Вблизи критической точки идеальной системы некоторые из этих величин велики и представляют собой сингулярные функции температуры. Это означает, что малое количество дефектов структуры может привести к большим эффектам вблизи критической точки, тем самым существенно изменяя критическое поведение чистой (однородной) системы. При этом могут измениться значения критических индексов. Возможно, что наличие дефектов приведет к сглаживанию сингулярного поведения некоторых величин. Может произойти размытие фазового перехода второго рода и исчезновение критической точки. Механизмы этих эффектов глубоко скрыты и до сих пор еще недостаточно изучены. Во всяком случае, ясно, что в неидеальной системе возникает характерный параметр – среднее расстояние между дефектами. При приближении к критической точке он начинает конкурировать с корреляционной длиной, что и обуславливает отклонение критического поведения неоднородной системы от поведения идеальной системы.

Дефекты принято разделять на два вида [64] в соответствии с их распределением в матрице. Если способ приготовления образца таков, что дефекты структуры находятся в равновесии с матрицей системы, то их принято называть расплавленными, или равновесными. Как правило, при приготовлении образца дефекты не успевают прийти в термодинамическое равновесие с матрицей и как бы замораживаются в ней в виде некоторой конфигурации, несущей память о способе приготовления системы. Такие дефекты принято называть замороженными.

В случае расплавленных дефектов структуры их концентрация играет роль дополнительной термодинамической переменной. Ее влияние на критическое поведение проявляется только в сдвиге критической температуры и перенормировке значений критических индексов с фактором $1/(1 - \alpha)$, если индекс теплоемкости однородной системы α положителен [71].

Феноменологический подход к описанию универсального критического по-

ведения систем определяется гамильтонианом H вида

$$H = \int d^d x \left\{ -h\phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}r\phi^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\nabla\phi(\mathbf{x}))^2 + \frac{u}{4!}\phi^4(\mathbf{x}) + \right. \\ \left. + (\text{более высокие степени } \phi(\mathbf{x}), \nabla\phi(\mathbf{x})) \right\}, \quad (1.89)$$

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

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

$$h = 0, \quad r = r^*, \quad u = u^*, \quad (1.90)$$

коэффициенты более высокой скейлинговой размерности равны нулю.

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

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

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

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

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

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

средним значением по распределению дефектов:

$$\langle\langle V(\mathbf{x}) \rangle\rangle = 0. \quad (1.91)$$

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

Распределение дефектов обычно задается через второй момент функции распределения

$$\langle\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{y}) \rangle\rangle = g(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (1.92)$$

В простейшем случае некоррелированных точечных дефектов [15]:

$$g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = v\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (1.93)$$

где $v \sim (\text{величина потенциала})^2 \times (\text{концентрация дефектов})$; d – размерность системы. Существуют более сложные и реалистичные модели. Модель с протяженными дефектами размерности ε_d , которые параллельны друг другу и хаотически распределены по объему образца [73], описывается распределением с

$$g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = v\delta^{d-\varepsilon_d}(\mathbf{x}_\perp - \mathbf{y}_\perp). \quad (1.94)$$

Другая модель, предложенная Вейнрибом и Гальпериным [75], учитывает эффекты корреляции дефектов со случайной ориентацией и описывается распределением с

$$g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-a}. \quad (1.95)$$

Учет моментов более высокого порядка не существенен для критического поведения.

Функционал свободной энергии F системы с дефектами определяется соотношением:

$$\exp(-F/kT) = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-H_0 - \frac{1}{2} \int d^dV(\mathbf{x})\phi^2(\mathbf{x})\right), \quad (1.96)$$

где H_0 – гамильтониан однородной системы. Для слабо неоднородной системы

можно воспользоваться разложением

$$\begin{aligned} \exp \left(-\frac{1}{2} \int d^d \mathbf{x} V(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{x}) \right) &= 1 - \frac{1}{2} \int d^d x V(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{x}) + \\ &+ \frac{1}{8} \int d^d x d^d y V(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{x}) V(\mathbf{y}) \phi^2(\mathbf{y}) + \dots \end{aligned} \quad (1.97)$$

и провести усреднение по примесям:

$$\begin{aligned} \langle\langle F/kT \rangle\rangle &= (F_0/kT) + \\ &+ \frac{1}{8} \int d^d x d^d y \langle\langle V(\mathbf{x}) V(\mathbf{y}) \rangle\rangle \langle \phi^2(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{y}) \rangle_0 + \dots, \end{aligned} \quad (1.98)$$

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

$$C = \frac{d^2(F_0/kT)}{dT^2} = \int d^d x d^d y \langle \phi^2(x) \phi^2(y) \rangle_0 \sim \tau^{-\alpha}, \quad (1.99)$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$. Используя гипотезу подобия, из которой следует, что свободная энергия $F_0 \sim \tau^{2-\alpha}$, и соотношений (1.9), (1.16) можно определить

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

Тогда асимптотическое поведение свободной энергии системы с дефектами как функции температуры может быть представлено в виде [70]:

$$\begin{aligned} \langle\langle F/kT \rangle\rangle &= \tau^{2-\alpha} A + \frac{\tau^{-\alpha+d\nu}}{8} \int d^d x g(\mathbf{x}) G \left(\frac{x}{\xi} \right) = \\ &= \tau^{2-\alpha} (A + B\tau^{-\varphi} + \dots), \end{aligned} \quad (1.100)$$

где φ – критический индекс кроссовера характеризует влияние дефектов на критическое поведение системы.

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

Для точечных дефектов (1.93)

$$\int d^d x g(\mathbf{x}) G(x/\xi) \sim \text{const} \quad (1.101)$$

и, следовательно, $\varphi = \alpha$. Таким образом, *точечные дефекты существенны, если $\alpha > 0$* . Это утверждение составляет суть так называемого эвристического критерия Харриса [14], согласно которому при отрицательном индексе теплоемкости ($\alpha < 0$) критическое поведение слабонеоднородной системы оказывается таким же, как у чистого вещества. Если же $\alpha > 0$, то при сохранении характера фазового перехода второго рода критические индексы отличаются по величине от индексов, измеряемых в случае чистого вещества.

Поскольку индексы зависят от числа компонент параметра порядка следующим образом:

$n = 1$ – изинговские магнетики: $\alpha > 0$,

$n = 2$ – XY магнетики: $\alpha < 0$,

$n = 3$ – гейзенберговские магнетики: $\alpha < 0$,

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

В случае модели протяженных дефектов

$$\int d^d x g(\mathbf{x}) G(x/\xi) \sim \tau^{\varepsilon d \nu}, \quad (1.102)$$

поэтому $\varphi = \alpha + \varepsilon d \nu$ [42], что приводит к новому критическому поведению.

В рамках модели Вейнриба–Гальперина

$$\int d^d x g(\mathbf{x}) G(x/\xi) \sim \tau^{(a-d)\nu} \quad (1.103)$$

и, следовательно, $\varphi = \alpha + (d-a)\nu = 2 - a\nu$ [75]. Видно, что протяженные дефекты и эффекты корреляции дефектов существенно сказываются на поведении более широкого класса систем, испытывающих фазовый переход второго рода. Таким образом, наличие дефектов небольшой концентрации не приводит к размыванию критического поведения. При этом, как показывают дополнительные исследования, влияние беспорядка, вызванного присутствием дефектов, сильнее проявляется в динамике.

Ренормгрупповой анализ с использованием ε -разложения [15, 70, 72] по-

казал, что критическое поведение неупорядоченных изингоподобных систем с точечными дефектами действительно характеризуется новым набором критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных дефектов в области их малых концентраций. Однако сходимость асимптотических рядов ε -разложения для систем с дефектами еще более слабая, чем для однородных. Экспериментальные исследования [76, 77] подтвердили численное отличие статических критических индексов для неупорядоченных систем от их значений для однородных систем и показали хорошее согласие с теоретическими результатами.

Из-за плохой асимптотической сходимости рядов ε -разложения и трудностей, возникающих при попытке учесть поправки более высокого порядка, результаты исследований критической динамики чистых, а тем более неупорядоченных систем с точечными некоррелированными дефектами значительно скромнее и носят скорее предварительный оценочный характер [87].

1.3. Компьютерное моделирование фазовых переходов

Большинство физических систем не являются изолированными, а обмениваются энергией с окружающей средой. Обычно такая система мала по сравнению со своим окружением и считается, что любое изменение энергии малой системы не влияет заметным образом на температуру большой системы. В результате большая система действует как термостат с заданной абсолютной температурой T . Если малую, но макроскопическую систему привести в тепловой контакт с термостатом, то она будет стремиться перейти в равновесное состояние путем обмена энергией с термостатом, и этот процесс будет продолжаться до тех пор, пока система не достигнет температуры термостата.

Представим себе бесконечно большое число воображаемых копий системы и среды - термостата. Вероятность P_n того, что система находится в микросостоянии, задаваемом набором квантовых чисел n , с энергией E_n , описывается формулой $W_n = (1/Z) \exp(-E_n/kT)$, где $1/Z$ - нормировочный множитель. Статистический ансамбль, определяемый данным выражением, называется каноническим. Поскольку

$$\sum_n W_n = 1, \quad (1.104)$$

то сумма по всем M микросостояниям системы

$$Z = \sum_n^M \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right). \quad (1.105)$$

Величина Z называется суммой по состояниям системы, или статистической суммой. С помощью функции канонического распределения W_n можно получить среднее по ансамблю от рассматриваемых физических величин. Например, средняя энергия равна

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n W_n = \frac{1}{Z} \sum_n E_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right). \quad (1.106)$$

Заметим, что в каноническом ансамбле возможны флуктуации энергии и других термодинамических величин, за исключением среднего числа частиц в системе ($N = \text{const}$).

Метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса

Метод Монте-Карло – это метод статистического моделирования на ЭВМ систем со многими степенями свободы. В основе его лежит использование случайных чисел для машинной имитации распределений вероятности, чем и объясняется название метода. В принципе метод можно реализовать, генерируя случайные числа с помощью обычной рулетки, однако его высокая эффективность обеспечивается только мощными ЭВМ. Поэтому первое успешное применение метода к одной из задач статистической физики стало возможным лишь в 1953 г., когда Метрополис и его коллеги исследовали свойства жидкости в рамках модели твердых дисков.

Рассмотрим применение метода Монте-Карло к моделированию поведения канонического ансамбля и, в частности, системы спинов в рамках модели Изинга. Будем моделировать систему N частиц, находящихся в объеме V при постоянной температуре T . Поскольку возможна генерация только ограниченного числа m из полного, в общем случае огромного числа M конфигураций,

можно получить оценку среднего значения $\langle A \rangle$ из выражений

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^M A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \cong \frac{\sum_{n=1}^m A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}, \quad (1.107)$$

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

$$\langle A \rangle \cong \frac{\sum_{n=1}^m \frac{A_n}{P_n} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \frac{1}{P_n} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}. \quad (1.108)$$

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

$$P_n = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}, \quad (1.109)$$

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

$$\langle A \rangle \cong \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m A_n. \quad (1.110)$$

Выбор P_n в таком виде предложен Метрополисом (1953). Приведем наиболее общую форму алгоритма Метрополиса на примере системы спинов.

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

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

Динамическая интерпретация процесса моделирования

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

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

$$\frac{dP_n}{dt} = - \sum_{n'} W(n \rightarrow n') P_n(t) + \sum_{n'} W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t), \quad (1.111)$$

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

$$W(n \rightarrow n') P_n(t) = W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t). \quad (1.112)$$

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

$$\frac{W(n \rightarrow n')}{W(n' \rightarrow n)} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{nm}}{kT}\right). \quad (1.113)$$

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

$$W(n \rightarrow n') = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta E_{nm}}{kT}\right), & \text{при } \Delta E_{nm} > 0, \\ 1, & \text{при } \Delta E_{nm} \leq 0. \end{cases} \quad (1.114)$$

или в виде функции Глаубера

$$W(n \rightarrow n') = \frac{1}{2} \left[1 - th \left(-\frac{\Delta E_{nm}}{2kT} \right) \right]. \quad (1.115)$$

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

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n A_n P_n(t). \quad (1.116)$$

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

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n P_n(t_0) A_n(t), \quad (1.117)$$

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

При решении задач статистической физики интерес представляет вычисление характеристик системы в термодинамическом пределе, когда число частиц стремится к бесконечности. Компьютерные эксперименты, однако, позволяют моделировать систему малого размера по сравнению с термодинамическим пределом. При этом начинают проявляться эффекты конечности размеров системы. Для их уменьшения осуществляется аппроксимация граничных условий. Существует несколько возможных вариантов:

- периодические граничные условия;
- свободная граница;
- нестандартные граничные условия.

Периодические граничные условия устраняют влияние поверхностных эффектов и наилучшим образом соответствуют моделированию поведения объемных систем. Они восстанавливают трансляционную инвариантность конечных

систем путем наложения условий на любую наблюдаемую величину A :

$$A(X_i) = A(X_i + L_i), \quad (1.118)$$

где $X_i = (X, Y, Z)$, $L_i = (L_1, L_2, L_3)$ – линейные размеры системы.

1.3.1. Релаксационные свойства модели. Установление состояния равновесия

Алгоритм Метрополиса с динамикой опрокидывания спина является вполне разумным приближением к реальной динамике анизотропного магнетика, спины которого связаны с колебаниями решетки. Эта связь приводит к беспорядочному опрокидыванию спинов. Этот стохастический процесс по сути своей соответствует марковскому процессу, генерируемому методом Монте-Карло в рамках алгоритма Метрополиса. При этом можно ожидать, что один шаг Монте-Карло на спин пропорционален среднему времени между опрокидываниями спинов, наблюдаемому в реальном физическом эксперименте. Следовательно, можно рассматривать динамику опрокидывания спина как настоящий нестационарный процесс и наблюдать релаксацию к равновесию по прошествии достаточно большого числа шагов.

Поставим вопрос об определении времени релаксации для двумерной модели Изинга, т. е. сколько времени в шагах Монте-Карло на спин (MCS/s) требуется системе для достижения равновесия? Для этого в рамках алгоритма Метрополиса проведем расчет и построим график зависимости намагниченности и энергии, приходящихся на спин, от числа шагов МК на спин. Входными параметрами являются температура термостата T и линейный размер решетки L . Исходной является конфигурация со спинами, направленными вверх.

Ярким проявлением аномальных свойств поведения систем при фазовых переходах второго рода является критическое замедление процесса релаксации системы, проявляющееся в медленном изменении со временем характерной термодинамической величины – параметра порядка (намагниченности M для ферромагнитных систем) при стремлении к состоянию равновесия

$$M(t) = \langle S(r, t) \rangle \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_r}\right), \quad (1.119)$$

$$\tau_r \sim |T - T_c|^{-z\nu} \rightarrow \infty, \quad (T \rightarrow T_c)$$

где τ_r - время релаксации системы, z - динамический критический индекс, ν - критический индекс корреляционной длины. На временах $t \gg \tau_r$ система приходит к состоянию равновесия. Расчет среднего значения физической величины A обычно занимает много времени. Поэтому желательно вычислять ее значения не чаще, чем это необходимо. Ясно, что нам не нужно вычислять A после опрокидывания только одного спина, поскольку значения A в обеих конфигурациях были бы почти одинаковыми. Идеальным было бы вычислять A для конфигураций, которые статистически независимы. Однако, поскольку время корреляции конфигураций изначально неизвестно, следует провести предварительные расчеты для оценки времени корреляции.

Один из способов определения временных интервалов, на которых конфигурации коррелированы, состоит в вычислении зависящих от времени автокорреляционных функций:

$$C_m(t) = \langle M(t)M(0) \rangle - \langle M(t) \rangle \langle M(0) \rangle, \quad (1.120)$$

$$C_e(t) = \langle E(t)E(0) \rangle - \langle E(t) \rangle \langle E(0) \rangle. \quad (1.121)$$

Величины $M(t)$ и $E(t)$ представляют собой значения намагниченности и полной энергии системы в момент времени t . При $t = 0$ функция $C_m(t)$ пропорциональна магнитной восприимчивости, а $C_e(t)$ пропорциональна теплоемкости. Для достаточно больших t функции $M(t)$ и $M(t')$ будут некоррелированы и $\langle M(t)M(0) \rangle = \langle M(t) \rangle \langle M(0) \rangle$. Следовательно, $C_m(t)$ и $C_e(t)$ должны стремиться к нулю при временах t , стремящимся к бесконечности. Обычно считается, что $C_m(t)$ и $C_e(t)$ убывают со временем по экспоненциальному закону.

$$C_m(t) \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_c^m}\right), \quad (1.122)$$

$$C_e(t) \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_c^e}\right), \quad (1.123)$$

$$\tau_c^m, \tau_c^e \sim |T - T_c|^{-z\nu} \rightarrow \infty, \quad (T \rightarrow T_c)$$

т.е. времена корреляции флуктуаций аномально растут с приближением к критической температуре. Оценкой времени корреляции для намагниченности τ_c^m

или τ_c^e служит время, за которое соответствующие корреляционные функции $C(t)$ уменьшаются в e раз по сравнению с их значениями при $t = 0$. Поскольку конфигурации, отстоящие на времена, меньшие времени корреляции, являются статистически коррелированными, необходимо вычислять требуемые равновесные физические величины для временных интервалов на три-четыре порядка больших времени корреляции.

1.3.2. Применение кластерного метода Вольфа для уменьшения эффектов критического замедления

Кластерный алгоритм для модели Изинга предложили Свендсен и Ванг [88] с целью уменьшения влияния эффектов критического замедления времени релаксации системы на результаты моделирования. Более производительный вариант алгоритма был предложен затем Вольфом [89]. Рассмотрим основные идеи этих алгоритмов. Пусть в узлах решетки расположены спиновые переменные, принимающие значения $S = \pm 1$, и задана некоторая начальная спиновая конфигурация. Введем понятие связи между спинами следующим образом. Если два спина антипараллельны, то связь между ними будет считаться всегда разорванной; если спины параллельны, то связь между ними будет считаться замкнутой с вероятностью $1 - \exp(-2/T)$ и разорванной с вероятностью $\exp(-2/T)$. Данный процесс коррелированной перколяции по связям разбивает решетку на так называемые физические кластеры (в отличие от процедуры, когда связи между сонаправленными спинами всегда замкнуты и генерируются геометрические кластеры). Если теперь присвоим спинам каждого физического кластера значения ± 1 с вероятностью $1/2$, то получим новую спиновую конфигурацию. Изложенная процедура представляет собой алгоритм Свендсена-Ванга.

Метод Вольфа отличается тем, что в решетке произвольно выбирается спин, затем строится физический кластер, которому этот спин принадлежит, а затем весь построенный кластер переворачивается.

Алгоритм Монте-Карло в варианте Вольфа

1. Выбирается случайным образом спин в решетке, который будем называть центральным. Затем центральный спин переворачивается, т.е. его значение меняется на противоположное.

2. Рассматриваются ближайшие соседи центрального спина. Если соседний спин направлен одинаково с неперевернутым центральным, то с вероятностью $1 - \exp(-2/T)$ этот спин переворачивается, а его координаты запоминаются в стеке.

3. После того как были проверены все соседние узлы, спин, координаты которого были загружены в стек последними, выбирается центральным и снова выполняется пункт 2.

4. Процедура переворота спинов заканчивается тогда, когда стек становится пустым. Этот процесс называется переворотом кластера, а все перевернутые спины считаются принадлежащими кластеру Вольфа.

По данному алгоритму реализуется марковский процесс и с соответствующей вероятностью генерируется равновесная конфигурация спинов.

1.3.3. Моделирование критического поведения неупорядоченных систем

При создании спиновой конфигурации со случайно распределенными примесями в решетке возникают несвязанные геометрические кластеры магнитных узлов. При концентрации спинов p больших порога спиновой перколяции p_c практически всегда существует спиновой кластер, протекающий с грани на грань, и какое-то количество изолированных кластеров, содержащих относительно небольшое число спинов. В пределе бесконечно большого размера вклад в магнитные характеристики системы будут давать только скоррелированные спины бесконечного перколяционного кластера, поэтому будет разумным при вычислении критических характеристик не учитывать вклад от узлов, не имеющих связи с перколяционным кластером. Такая процедура позволяет уменьшить «шум» от спинов кластеров конечного размера. Для распределения спинов с заданной концентрацией p по узлам решетки удобно использовать алгоритм выращивания перколяционного кластера Хаммерсли-Лиса-Александровица [90]. Практические детали реализации алгоритма следующие. В центре кубической решетки размещается затравочный спин. Шесть соседних узлов образуют «периметр» затравочного спина. Случайным образом выбирается узел из «периметра». Затем с вероятностью p этот узел занимает спином, а его соседи добавляются в «периметр». В противном случае

узел остается свободным (примесным). Чтобы узлы решетки оставались свободными с вероятностью $1 - p$, данный узел больше не проверяется. Если узел уже занят спином, то определяется, нет ли новых непроверенных узлов «периметра». Процедура повторяется до тех пор, пока не будут просмотрены все узлы периметра. Метод Монте-Карло при процедуре моделирования поведения неупорядоченных систем претерпевает ряд изменений. Атомам примеси при моделировании ставятся в соответствие пустые узлы. Спин соответствующего пустого узла полагается равным нулю. Алгоритм Метрополиса при этом сохраняется, как и для однородных

с учетом того что вклад в энергию взаимодействия магнитного атома со спином $S \neq 0$ с немагнитным атомом со спином $S = 0$ оказывается равным нулю. Следует отметить, что для каждой выращенной на решетке примесной конфигурации реализуется алгоритм Метрополиса получения различных термодинамических характеристик системы спинов как величин, усредненных по числу шагов Монте-Карло. Однако искомая термодинамическая характеристика неупорядоченной системы получается лишь после дополнительного усреднения получаемых величин для отдельных конфигураций по полному набору выращенных различных примесных конфигураций. При этом значения термодинамических характеристик будут более достоверными с увеличением числа примесных конфигураций, используемых при усреднении. Для получения надежных значений универсальных характеристик критического поведения структурно неупорядоченных систем необходимы значительные вычислительные мощности, отождествляемые прежде всего с суперкомпьютерными системами. Существенный рост вычислительного времени при моделировании неупорядоченных систем по сравнению с однородными связан с необходимостью дополнительного усреднения по распределению дефектов в образце и более значительному проявлению критического замедления, связанного с дополнительным взаимодействием флуктуаций параметра порядка через поле дефектов. Поэтому особенно важно при моделировании фазовых переходов в неупорядоченных системах использовать параллельные методы вычислений. Для подобных систем задача о критическом поведении неупорядоченных систем допускает крупноблочную декомпозицию. Самая эффективная параллелизация методов Монте-Карло возникает при расчете каждой примесной конфигурации спиновой системы со статистическими прогонками на отдельном процес-

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

1.4. Основные понятия и модельные представления теории неравновесного поведения

Эффекты старения, проявляющиеся на неравновесном этапе релаксации системы с медленной динамикой, характеризуются существованием двухвременных зависимостей для таких функций, как корреляционная функция и функция отклика от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t - t_w$. Время ожидания определяется временем, прошедшим с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течение $t - t_w \ll t_{\text{rel}}$, где t_{rel} — время релаксации системы, во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы и эффектов старения, характеризующихся как нарушением трансляционной симметрии системы во времени, так и замедлением релаксационных и корреляционных процессов с увеличением «возраста» образца t_w .

Предполагается, что неравновесное поведение системы реализуется путем ее перевода в начальный момент времени $t = 0$ из равновесного состояния при температуре T_0 в состояние при температуре T_s , не равной температуре T_0 . Возникающий в системе процесс установления равновесия характеризуется временем релаксации $t_{\text{rel}}(T_s)$ и на временах $t \gg t_{\text{rel}}(T_s)$ достигается состояние равновесия, соответствующее температуре T_s , и динамика системы оказывается стационарной и инвариантной относительно обращения времени. Однако на временах $0 < t \ll t_{\text{rel}}(T_s)$ эволюция системы зависит от начального состояния системы.

В критической области при фазовом переходе второго рода время релаксации системы t_{rel} является расходящейся величиной $t_{\text{rel}} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Поэтому в критической точке система не достигает равновесия в течении всего релаксационного процесса. На временах $t \ll t_{\text{rel}}$ ожидается проявление эффектов старения в двухвременной зависимости для корреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика на внешнее возмущение $R(t, t_w)$.

Для спиновой системы, характеризуемой спиновой плотностью $S(x, t)$, временная корреляционная функция определяется выражением

$$C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) S(0, t_w) \rangle - \langle S(x, t) \rangle \langle S(0, t_w) \rangle], \quad (1.124)$$

а функция отклика на малое внешнее магнитное поле $h(x, t)$, применяемое к системе в момент времени t_w , соотношением

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0} \quad (1.125)$$

соответствии с принципом причинности $R(t, t_w > t) = 0$.

Согласно общим представлениям о релаксационном процессе ожидается, что для времен $t > t_w \gg t_{\text{rel}}(T_s)$, $C(t, t_w) = C^{\text{eq}}(t - t_w)$ and $R(t, t_w) = R^{\text{eq}}(t - t_w)$, где C^{eq} и R^{eq} — величины, соответствующие состоянию равновесия. Флуктуационно-диссипативная теорема устанавливает связь между данными величинами и их изменением со временем

$$R^{\text{eq}}(t) = -\frac{1}{T_s} \frac{dC^{\text{eq}}(t)}{dt}. \quad (1.126)$$

Флуктуационно-диссипативная теорема обобщается на случай неравновесной динамики системы с $t, t_w \ll t_{\text{rel}}$

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T_s} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (1.127)$$

где вводится $X(t, t_w)$ — флуктуационно-диссипативное отношение (ФДО)

$$X(t, t_w) = \frac{T_s R(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)} \quad (1.128)$$

с $t > t_w$. Флуктуационно-диссипативная теорема устанавливает, что в равновесном состоянии $X(t > t_w \gg t_{\text{rel}}) = 1$. Предельное значение

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w) \quad (1.129)$$

может быть использовано в качестве универсальной характеристики неравновесного поведения систем с медленной динамикой. Более того $X^\infty \neq 1$ может

служить указанием на осуществление в системе неравновесного поведения. Наряду с этим величина X^∞ может использоваться для определения эффективной неравновесной температуры $T_{\text{eff}} = T/X^\infty$, которая обладает рядом свойств температуры равновесной системы, т. е. характеризует направление тепловых потоков в системе и служит критерием ее термализации.

Выясним общие свойства величины X^∞ и ее зависимость от температуры замораживания T_s системы. Так как следствие флуктуационно-диссипативной теоремы устанавливается, что для состояний системы с температурой $T_s > T_c X^\infty (T_s > T_c) = 1$. С другой стороны, на основе общих скейлинговых аргументов в работе [79] было показано, что для низкотемпературной упорядоченной фазы с $T_s < T_c X^\infty (T_s < T_c) = 0$. Ожидается, что эти результаты не зависят от специфических свойств отдельных систем. Однако для $T_s = T_c$ не существует общих аргументов, устанавливающих значение $X^\infty (T_c)$ и поэтому оно должно определяться для каждой отдельной статистической модели. В таблице 1.2 мы привели значения X^∞ для ряда статистических моделей, которые были определены или в результате точных решений, или при численных Монте-Карло исследованиях (более полная таблица для X^∞ дана в работе [45]).

Таблица 1.2 Значения флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для систем с высокотемпературным начальным состоянием с $m_0 \ll 1$

Модель			$T_s < T_c$	$T_s = T_c$	$T_s > T_c$
Свободное гауссово поле	[78]	точное	—	1/2	1
dD сферическая модель	[79]	точное	0	$1 - 2/d$	1
1D модель Изинга	[82]	точное	—	1/2	1
2D модель Изинга	[79]	МК		0, 26(1)	
	[80]	МК		0, 340(5)	
	[81]	МК		0, 330(5)	
2D модель Поттса с $q = 3$ состояниями	[81]	МК		0, 406(2)	
2D модель Поттса с $q = 4$ состояниями	[81]	МК		0, 459(8)	
3D модель Изинга	[79]	МК	0	$\approx 0, 40$	
3D XY модель	[83]	МК	0	0, 43	

Из представленных в таблице значений ясно, что $X^\infty (T_s = T_c)$ зависит от специфических свойств модели ее пространственной размерности d . Тем не

менее в работах [79, 84] на основе скейлинговых аргументов утверждается, что предельное флуктуационно-диссипативное отношение при критической температуре $X^\infty (T_s = T_c)$ должно быть универсальной величиной, связанной с классом универсальности критической динамики модели.

В настоящее время хорошо известно, что двухвременные зависимости для автокорреляционной функции и функции отклика при релаксации системы из высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0$ (или $m_0 \ll 1$) удовлетворяют следующим скейлинговым формам:

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &= A_C(t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\theta-1} f_C(t_w/t), \\ R(t, t_w) &= A_R(t - t_w)^{a-d/z} (t/t_w)^\theta f_R(t_w/t), \end{aligned} \quad (1.130)$$

где функции $f_C(t_w/t)$ и $f_R(t_w/t)$ являются конечными для $t_w \rightarrow 0$, $a = (2 - \eta - z)/z$, $\theta = \theta' - (2 - z - \eta)/z$, θ' является критическим индексом, характеризующим начальный рост намагниченности [85]. A_R и A_C — неуниверсальные амплитуды, значения которых фиксируются условиями $f_{R,C}(0) = 1$. При данных нормировочных условиях функции $f_{R,C}$ приобретают универсальные свойства. Из данных скейлинговых форм следует универсальность величины X^∞ как выражающейся через отношение амплитуд $X^\infty = A_R/[(1 - \theta)A_C]$ [45, 79, 84].

Одним из необычных свойств неравновесного критического поведения систем, релаксирующих из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$, является увеличение намагниченности со временем наблюдения, удовлетворяющее степенному закону $M(t) \sim t^{\theta'}$ на временах $t < t_{cr} \sim m_0^{-1/(\theta' + \beta/z\nu)}$ (пример такого поведения намагниченности $M(t)$ для трехмерной модели Изинга с различными спиновыми концентрациями приведен на рисунке 1.1). Неравновесный этап начального роста намагниченности сменяется на временах $t \gg t_{cr}$ на привычную долговременную динамику уменьшения намагниченности со временем по степенному закону $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$. Критические индексы θ и θ' зависят от принадлежности системы к тому или иному динамическому классу универсальности критического поведения [86] и были рассчитаны ренормгрупповыми методами для ряда динамических моделей, таких как модель с несохраняющимся параметром порядка (модель A по классификационной схеме Гальперина-Хоэнберга [86]) [87, 91, 102], модель со связью параметра порядка с сохраняющимся полем (модель C) [92] и модели со связью параметра порядка

с гидродинамическими возбуждениями, имеющими характер прецессионного движения в магнетиках (модели E , F , G и J) [92].

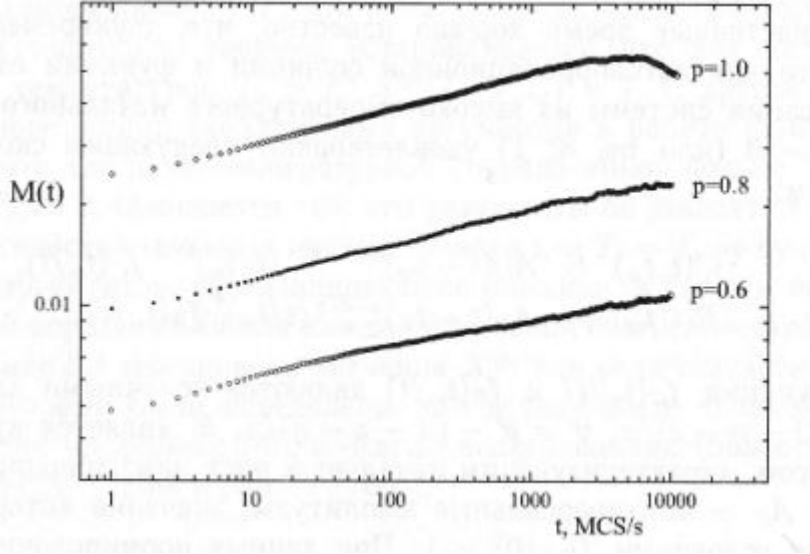


Рисунок 1.1 Временная зависимость намагниченности $M(t)$ неравновесном этапе эволюции трехмерной модели Изинга для различных спиновых концентраций p

На основе анализа двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика (1.130) в неравновесном процессе релаксации системы можно выделить три этапа (режима) его протекания. Первый квазиравновесный этап эволюции осуществляется для малых времен наблюдения $t - t_w \ll t_w$ с $t_w \gg 1$, когда еще не успевает проявиться зависимость автокорреляционной функции и функции отклика от времени ожидания и они демонстрируют стационарный характер своего изменения $C = C(t - t_w) \sim (t - t_w)^{-(d-2+\eta)/z}$ и $R = R(t - t_w) \sim (t - t_w)^{-(d-2+\eta+z)/z}$. Вторым этапом с проявлением эффектов старения реализуется на временах $t - t_w \sim t_w \gg 1$, на котором уже ярко проявляется двухвременная зависимость для автокорреляционной функции и функции отклика и характеризуется соотношениями

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} \hat{F}_C(t/t_w), \\ R(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta(\nu z)-1} \hat{F}_R(t/t_w), \end{aligned} \quad (1.131)$$

в которых была использована связь между критическими индексами $2\beta/(\nu z) = d/z - a - 1$. В результате для разных времен ожидания t_w кривые для данных функций, рассматриваемые на шкале времени наблюдения $t - t_w$, уже не совпадают друг с другом и при этом в соответствии с (1.131) характеризуются

ся различным наклоном для каждого значения t_w . Для этапа с существенно неравновесной эволюцией системы с временами наблюдения $t - t_w \gg t_w \gg 1$ скейлинговые функции $\hat{F}_c(t/t_w)$ $\hat{F}_R(t/t_w)$ в (1.131) характеризуются убывающей степенной зависимостью

$$\hat{F}_c(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a}, \quad \hat{F}_R(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_r} \quad (1.132)$$

с показателем $c_a = d/z - \theta'$, совпадающим с показателем, определяющим временную зависимость автокорреляционной функции в коротковременном режиме неравновесного критического поведения системы [94, 102, 196]. На этом этапе коротковременной динамики эффекты старения не проявляются. Скейлинговый анализ поведения функции отклика $R(t, t_w)$ в режиме коротковременной динамики предсказывает, что $c_r = c_a$.

Ренормгрупповые исследования неравновесного критического поведения как <чистых>, так и структурно неупорядоченных систем с чисто диссипативной динамикой, описываемой моделью А [86], были проведены соответственно в работах [93] и [95] с применением метода ε -разложения. В данных работах был проведен расчет асимптотических значений флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для <чистых> систем с n -компонентным параметром порядка [93], давшим в двухпетлевом приближении следующее выражение

$$\begin{aligned} \frac{(X^\infty)^{-1}}{2} = 1 + \frac{n+2}{4(n+8)}\varepsilon + \\ + \varepsilon^2 \frac{n+2}{(n+8)^2} \left[\frac{n+2}{8} + \frac{3(3n+14)}{4(n+8)} + c \right] + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (1.133)$$

где $c = -0,0415\dots$ (аналитическое выражение для c приведено в статье [93]). Для разбавленной модели Изинга в работе [93] было получено в однопетлевом приближении выражение

$$X^\infty = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{6\varepsilon}{53}} + O(\varepsilon). \quad (1.134)$$

На основе соотношения (1.133) были получены следующие значения: $X_{3\text{DI}_s}^\infty = 0,429(6)$ для трехмерной модели Изинга ($\varepsilon = 1, n = 1$), $X_{3\text{DX}_Y}^\infty = 0,416(8)$ для XY модели ($\varepsilon = 1, n = 2$) и $X_{2\text{DI}_s}^\infty = 0,30(5)$ для двумерной модели Изинга ($\varepsilon = 2, n = 1$), которые находятся в хорошем согласии с резуль-

татами Монте-Карло исследований, при веденными в таблице 1.2. Для трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга было получено значение $X_{3\text{DRIM}}^\infty \simeq 0,416$. Как отмечается авторами работы [95], данные результаты вычисления X^∞ в первом порядке теории не позволяют из сопоставления с результатами для <чистой> модели выделить характер и особенности влияния дефектов на флуктуационно-диссипативное отношение, для этого требуется проведение вычислений в более высоких порядках теории. Тем более, в ряде работ [18, 74] было показано, что ряды разложения по величине $\sqrt{\varepsilon}$ не очень хорошо ведут себя для реальных трехмерных систем при подстановке $d = 3$.

Если начальное состояние системы характеризуется намагниченностью $m_0 \neq 0$ (низкотемпературное начальное состояние) последующим ее замораживанием при $T_s = T_c$, то ренормгрупповой анализ неравновесной критической динамики для систем, описываемых полностью диссипативной моделью А, предсказывает, что корреляционная функция $C(t, t_w)$ и функция отклика $R(t, t_w)$ демонстрируют следующее скейлинговое поведение [85, 97]

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &= a_C (t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\theta-1} F_C(t_w/t, t/t_m), \\ R(t, t_w) &= a_R (t - t_w)^{a-d/z} (t/t_w)^\theta F_R(t_w/t, t/t_m). \end{aligned} \quad (1.135)$$

Модификация данных соотношений в сравнении с соотношениями (1.130) связана с введением нового временного масштаба t_m , определяемого начальным значением намагниченности m_0 и связанного с ним следующей универсальной зависимостью

$$t_m = B_m m_0^{-1/\kappa}, \quad (1.136)$$

в которой показатель $\kappa > 0$ выражается через статические и динамические критические индексы, как $\kappa = \theta + \alpha + \beta/(vz)$.

В результате двухвременные функции $C(t, t_w)$ и $R(t, t_w)$ оказываются обобщенно-однородными функциями трех временных масштабов $t - t_w$, t_w и t_m . В частности, когда $t_m < t \ll t_m$, которое выполняется всегда для случая с начальной намагниченностью $m_0 = 0$, скейлинговые соотношения (1.135) для C и R сводятся к соотношениям (1.130) с $F_{C,R}(x, 0) = f_{C,R}(x)$. В противном случае, с $t_m \ll t_w < t$ скейлинговые соотношения (1.135) приобретают следую-

щий вид [97]:

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &= \bar{a}_C (t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\bar{\theta}-1} \bar{F}_C(t_w/t), \\ R(t, t_w) &= \bar{a}_R (t - t_w)^{a-d/z} (t/t_w)^{\bar{\theta}} \bar{F}_R(t_w/t), \end{aligned} \quad (1.137)$$

где новый показатель $\bar{\theta} = -\beta\delta/(\nu z) = -(1 + a + \beta/(\nu z))$, а $\bar{F}_{C,R}$ являются универсальными скейлинговыми функциями, связанными с поведением $F_{C,R}(x, y)$ при больших значениях аргумента y . В режиме старения, который реализуется для времен $t - t_w \sim t_w \gg t_m$, двухвременная зависимость корреляционной функции и функции отклика описывается соотношениями

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} \tilde{F}_C(t/t_w), \\ R(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/(\nu z)-1} \tilde{F}_R(t/t_w) \end{aligned} \quad (1.138)$$

со скейлинговыми функциями $\tilde{F}_{C,R}(t/t_w)$, которые затухают на больших временах наблюдения $t - t_w \gg t_w \gg t_m$ в соответствии со степенным законом

$$\tilde{F}_{C,R}(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-\phi}, \quad (1.139)$$

характеризуемым показателем $\phi = d/z - a + \beta\delta/(\nu z)$.

В статье [98] было осуществлено ренормгрупповое исследование неравновесного критического поведения d -мерной модели Изинга с чисто диссипативной динамикой при ее релаксации из намагниченного начального состояния. В работе были определены универсальные скейлинговые формы двухвременной зависимости для функции отклика и автокорреляционной функции и в рамках теоретико-полевого подхода были рассчитаны скейлинговые функции в первом порядке ε -разложения. Были выявлены эффекты старения и проведен расчет универсального предельного флуктуационно-диссипативного отношения

$$X^\infty = \frac{4}{5} \left(\frac{73}{600} - \frac{\pi^2}{100} \right) \varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (1.140)$$

Данное выражение дает значение $X_{3DI_s}^\infty \simeq 0,78$ для трехмерной модели Изинга ($\varepsilon = 1, n = 1$) и значение $X_{2DI_s}^\infty \simeq 0,75$ для двумерной модели Изинга ($\varepsilon = 2, n = 1$). Полученные результаты получили частичное подтверждение при проведении авторами статьи [97] численных Монте-Карло исследований неравно-

весного критического поведения для двумерной модели Изинга, в результате которых было получено значение $X_{MC}^{\infty} = 0,73(1)$.

1.5. Выводы

Проведенный анализ состояния теории критических явлений позволяет сделать ряд выводов. Наиболее последовательным и разработанным для описания аномально сильного взаимодействия флуктуаций параметра порядка и ряда других сильно флуктуирующих величин вблизи критической точки является теоретико-полевой подход, позволяющий реализовать ренормгрупповое описание критических явлений в высоких порядках приближения теории по амплитудам взаимодействия флуктуаций непосредственно для трехмерных и двумерных систем без использования метода ε -разложения.

Одним из наиболее сложных и интересных направлений современной теории критических явлений является исследование влияния неупорядоченности системы, создаваемой присутствием дефектов структуры, на критическое поведение. Плохая асимптотическая сходимость рядов ε -разложения разложения, получаемых для характеристик критического поведения неупорядоченных систем, не позволяет считать достигнутые результаты достоверными. В связи с этим актуальным является развитие методики и осуществление теоретико-полевого описания неравновесного критического поведения однородных и структурно неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры в многопетлевом приближении с применением методов суммирования. Значительный интерес представляет задача исследования аномально медленной критической динамики спиновых систем, обусловленной неравновесностью начальных состояний и влиянием дефектов структуры. Актуальной является задача проведения ренормгруппового исследования одновременного влияния эффектов нарушения пространственной трансляционной симметрии системы, создаваемых присутствием дефектов структуры, и эффектов нарушения временной трансляционной симметрии, обусловленных неравновесными начальными условиями системы, на характеристики неравновесного критического поведения различных систем. Подтверждение результатов теоретических расчетов может быть получено при численном исследовании критического поведения неупорядоченной ферромагнитной модели Изинга с дефектами типа случайной

локальной температуры фазового перехода методами Монте-Карло. Актуальным с этой точки зрения является осуществление компьютерного моделирования как равновесных, так и неравновесных процессов критической релаксации в неупорядоченной трехмерной модели Изинга при изменении концентрации некоррелированных дефектов структуры в широком интервале от уровня слабого разбавления до концентраций, близких к порогу перколяции. Сопоставление полученных результатов с результатами теоретико-полевого расчета для чистых и слабо неупорядоченных систем позволит внести ясность в вопрос об универсальности критического поведения неупорядоченных систем. Если в случае структурно неупорядоченных систем со случайным возмущением типа локальной температуры фазового перехода к настоящему времени существует понимание особенностей влияния дефектов на критическое поведение систем, то в случае систем со случайными магнитными полями, несмотря на интенсивные теоретические и экспериментальные усилия в течение последних тридцати лет, мало надежно установленных фактов о поведении данных неупорядоченных систем. Выявление особенностей критического поведения систем со случайными магнитными полями по сравнению с системами со случайной локальной температурой фазового перехода наиболее наглядно может быть осуществлено при компьютерном моделировании методом Монте-Карло критического поведения неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга во внешнем магнитном поле с учетом взаимодействия как ближайших, так и следующих за ближайшими соседей. Данная модель замечательна тем, что в отсутствие внешнего поля она позволяет описывать критическое поведение неупорядоченной системы со случайной локальной температурой фазового перехода, а во внешнем однородном магнитном поле критическое поведение системы со случайными полями. Исследование данной модели дает уникальную возможность проследить за нарастанием отличительных свойств в термодинамическом поведении модели со случайными полями по сравнению с поведением модели со случайной локальной температурой по мере увеличения напряженности внешнего магнитного поля и концентрации дефектов структуры.

Глава 2

Компьютерное моделирование равновесного критического поведения структурно неупорядоченных магнетиков

Исследование критического поведения неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Большинство реальных твердых тел содержит замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на характеристики систем и может сильно модифицировать поведение систем при фазовых переходах. Это приводит к возникновению новых сложных явлений в структурно неупорядоченных системах, обусловленных эффектами аномально сильного взаимодействия флуктуаций ряда термодинамических величин, когда любое возмущение, вносимое дефектами структуры даже при их низкой концентрации, может привести к сильному изменению состояния системы. Для описания таких систем требуется разработка специальных аналитических и численных методов. При изучении влияния структурного беспорядка на фазовые переходы второго рода возникают два вопроса: изменяются ли критические индексы однородного магнетика при разбавлении его примесью немагнитных атомов, и если да, то являются ли новые критические индексы универсальными, т. е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции. Ответ на первый вопрос был дан в работе [14], где показано, что критические индексы систем с замороженными дефектами структуры изменяются по сравнению с их однородными аналогами, если критический индекс теплоемкости однородной системы положителен. Этому критерию удовлетворяют лишь трехмерные системы, чье критическое поведение описывается моделью Изинга. Исследованиям ренормгрупповыми методами, численными методами Монте-Карло и экспериментальным исследованиям критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков к настоящему моменту посвящено значительное число работ (см. обзор [18]). И если на вопрос о существовании нового класса универсальности критического поведения, который образуют разбавленные изингоподобные магнетики, уже получен положительный ответ, то вопросы о независимости асимптотических значений критических индексов от степени разбавления системы, мере влияния кроссоверных эффектов на эти значения, а также о возможности существования двух или более режимов критического поведения для слабо и сильно неупорядоченных

систем остаются открытыми и горячо обсуждаются. В данной главе представлены результаты численного исследования критического поведения разбавленной трехмерной модели Изинга в широкой области изменения концентрации замороженных точечных дефектов. Высокие требования, предъявленные в процессе проведенных исследований к условиям моделирования, широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20 - 400$, рассмотренных в процессе исследования, выбранные температуры моделирования, исключительно близкие к критической температуре с $\tau = \frac{T-T_c}{T_c} = 5 \cdot 10^{-4} - 10^{-2}$, и позволяющие выделить асимптотические значения характеристик, высокая статистика, использованная в процессе усреднения термодинамических и корреляционных функций по различным примесным конфигурациям, использование для обработки результатов моделирования методики конечноразмерного скейлинга [46], позволяющей наряду с асимптотическими значениями термодинамических функций получать для них скейлинговые функции, применение для выделения асимптотических значений критических индексов поправок к скейлингу, – все это позволяет нам считать, что достигнутые результаты носят уникальный характер.

Результаты исследований опубликованы в работах [99–117, 218] и получены совместно с В.В. Прудниковым и П.В.Прудниковым. Личный вклад автора заключается в получении большей части методических результатов, разработке программного кода и в проведении значительной части расчетов, анализе и интерпретации полученных данных и написании статей. А.С.Криницын принимал участие в разработке программного кода процедуры обработки результатов моделирования и обсуждении результатов. Бородихин В.Н. принимал участие в тестовых расчетах для систем с малой концентрацией точечных дефектов.

2.1. Модель и методика моделирования

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

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j \quad (2.1)$$

где J – короткодействующее обменное взаимодействие между закрепленными в узлах решетки спинами S_i , принимающими значения ± 1 . Немагнитные атомы примеси образуют пустые узлы. Числа заполнения p_i при этом принимают значения 0 или 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(1 - p_i) \quad (2.2)$$

с $p = 1 - c$, где c – концентрация атомов примеси. Примесь равномерно распределяется по всей системе, и при моделировании ее положение фиксируется для отдельной примесной конфигурации. Нами рассматривались в процессе исследования неупорядоченные системы со значениями спиновых концентраций $p = 0.95; 0.8; 0.6; 0.5$. Для снижения влияния эффектов критического замедления и корреляции различных спиновых конфигураций в работе был применен наиболее эффективный в этом смысле [89] однокластерный алгоритм Вольфа. За один шаг Монте-Карло на спин (MCS) принималось от 10 до 20 переворотов кластера Вольфа в зависимости от линейного размера моделируемой решетки, спиновой концентрации системы и близости температуры к критической точке. Процедуре установления термодинамического равновесия в системе отводилось 10^4 шагов Монте-Карло и 10^5 шагов Монте-Карло отводилось на статистическое усреднение моделируемых величин при заданной примесной конфигурации. Для определения средних значений термодинамических и корреляционных функций наряду со статистическим усреднением применялось усреднение по различным примесным конфигурациям: для систем с $p = 0.95$ усреднение проводилось по 3000 образцов, для $p = 0.80$ – по 5000 образцов, для $p = 0.60; 0.50$ по 10 000 образцов. В процессе моделирования различных спиновых систем на решетках с линейным размером L осуществлялся расчет корреляционной длины ξ_L и восприимчивости χ_L в соответствии со следующими соотношениями:

$$\xi = \frac{1}{2\sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\chi}{F} - 1}, \quad \chi = \frac{1}{pL^3} \overline{M^2}, \quad (2.3)$$

где $M = \sum_i p_i S_i$, $F = \overline{\langle \Phi \rangle} / pL^3$

$$\Phi = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_i p_i S_i \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,i}}{L}\right) \right|^2, \quad (2.4)$$

где $(x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i})$ - координаты i -го узла решетки, $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта сверху – усреднение по примесным конфигурациям. Была определена температурная зависимость $\xi_L(T)$ и $\chi_L(T)$ в температурном интервале $\tau = 5 \cdot 10^{-4} - 10^{-2}$ для образцов с $p = 0.95$ и линейными размерами в интервале $L = 20 - 400$, для образцов с остальными спиновыми концентрациями температуры выбирались в интервале $\tau = 10^{-3} - 10^{-2}$ при изменении L в интервале от $L = 20 - 300$. При компьютерном моделировании значение L_{max} для каждой температуры ограничивалось тем размером решетки, при котором корреляционная длина и восприимчивость системы выходили на свои асимптотические значения. В соответствии с работами [118, 119] и проведенными нами исследованиями выбранные условия моделирования обеспечивают гарантированное получение равновесных значений для измеряемых термодинамических величин для всех рассмотренных размеров решеток и спиновых концентраций, так как времена автокорреляции для намагниченности и энергии даже для самых близких из выбранных температур к критической точке оказываются не больше десяти шагов Монте-Карло на спин с учетом выбранного за шаг числа переворотов кластера Вольфа.

2.2. Метод конечноразмерного скейлинга и результаты моделирования

Известно, что настоящий фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц в ней стремятся к бесконечности. Для определения асимптотических значений термодинамических величин $A(T)$, испытывающих аномальное поведение вблизи критической температуры, по их значениям $A_L(T)$, определяемым на конечных решетках, широко используются представления теории скейлинга об обобщенной однородности термодинамических функций в критической области относительно масштабных преобразований системы, на основе которых были развиты различные методы конечноразмерного скейлинга. В данной работе был применен метод, предложенный в работе [46] и апробированный авторами на анализе результатов моделирования критического поведения двумерной и трехмерной однородных моделей Изинга. Идея метода заключается в том, что в соответствии с теорией скейлинга размерная зависимость неко-

торой термодинамической величины A_L , определенной на конечной решетке, в отсутствие внешнего магнитного поля может быть представлена в критической области в виде

$$A_L(\tau) = L^{\delta/\nu} f_A(s_L(\tau)), s_L = L/\xi_L(\tau), \quad (2.5)$$

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

$$L^{\delta/\nu} = A(\tau) s_L^{\delta/\nu}(\tau), \quad (2.6)$$

В результате (5) может быть записано в виде

$$A_L(\tau) = A(\tau) F_A(s_L(\tau)), \quad (2.7)$$

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

$$F_A(s_L(\tau)) = s_L^{\delta/\nu}(\tau) f_A(s_L(\tau)) \quad (2.8)$$

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

$$A(\tau) = A_L(\tau)/Q_A(x_L(\tau)), \quad (2.9)$$

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

$$Q_A(x_L(\tau)) = F_A(f_\xi^{-1}(x_L(\tau))), \quad (2.10)$$

Скейлинговая функция $Q_A(x_L(\tau))$, определяемая в интервале $0 \leq x_L \leq x_c$ с x_c значением аргумента, не зависящим от L в критической области, должна удовлетворять следующим асимптотическим условиям: $\lim_{x \rightarrow 0} Q_A(x) = 1$ и $\lim_{x \rightarrow x_c} Q_A(x) = 0$. Для того чтобы удовлетворить асимптотическим условиям, по аналогии с работой [46], выбирались скейлинговые функции для восприимчивости и корреляционной длины как в виде полиномиальной зависимости от x , так и от

$\exp(-1/x)$:

$$Q_A(x) = 1 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4, \quad (2.11)$$

$$Q_A(x) = 1 + c_1e^{-1/x} + c_2e^{-2/x} + c_3e^{-3/x} + c_4e^{-4/x}, \quad (2.12)$$

с подбираемыми по методу наименьших квадратов коэффициентами c_n для каждой температуры T . Была реализована следующая схема конечноразмерного скейлинга:

1. Для произвольного τ_0 в критической области температур измерялись величины $A_L(\tau_0)$ и $x(L, \tau_0) = \xi_L(\tau_0)/L$ для решеток с увеличивающимся размером L .
2. Термодинамическое значение величины $A(\tau_0)$ определялось как значение $A_L(\tau_0)$, которое оказывается не зависящим от L в пределах погрешностей измерения.
3. Осуществлялась процедура обработки данных измерения для $A_L(\tau_0)/A(\tau_0)$ методом наименьших квадратов с целью определения соответствующей функциональной формы для скейлинговой функции $Q_A(x_L(\tau_0))$.
4. Процедура повторялась для других τ в области $\tau \simeq 10^{-3} - 10^{-2}$.
5. Определялась усредненная скейлинговая функция Q_{aver}^A на основе функций $Q_A(x(L, \tau_i))$, найденных для различных температур τ_i при фиксированной спиновой концентрации p образцов.
6. Определялась температурная зависимость для асимптотических значений термодинамической величины посредством подстановки $A_L(\tau)$ и Q_{aver}^A в соотношение 2.9.

В таблицах 2.1 - 2.4 приведены результаты компьютерного моделирования для различных спиновых концентраций.

Таблица 2.1 Данные компьютерного моделирования для системы с $p = 0.95$

Т	L	ξ_L	χ_L	x_L	Т	L	ξ_L	χ_L	x_L
4.265	400	62.13(7)	14359(32)	0.1553	4.275	120	21.12(3)	1713.4(5.6)	0.1760
	300	61.87(11)	14211(48)	0.2062		100	21.10(4)	1707.1(7.1)	0.2110
	240	61.17(14)	13785(63)	0.2549		90	21.00(4)	1692.0(5.8)	0.2333
	200	59.89(14)	13134(60)	0.2994		80	20.72(4)	1645.0(6.0)	0.2590
	150	56.01(16)	11334(62)	0.3734		70	20.44(4)	1595.0(6.7)	0.2920
	140	54.75(17)	10782(61)	0.3911		60	19.90(5)	1501.5(7.5)	0.3317
4.280	110	17.00(3)	1122.5(3.7)	0.1545	4.285	110	14.41(1)	813.2(1.4)	0.1310
	100	16.98(2)	1119.2(2.9)	0.1698		90	14.41(1)	812.6(1.5)	0.1601
	80	16.91(3)	1109.3(3.9)	0.2114		80	14.39(2)	810.2(1.8)	0.1799
	70	16.79(4)	1092.7(4.5)	0.2399		70	14.31(2)	805.9(2.2)	0.2044
	50	16.11(5)	996.7(5.2)	0.3222		60	14.21(2)	795.7(2.6)	0.2368
						50	13.94(3)	765.6(3.0)	0.2788
4.295	80	11.36(1)	511.9(0.8)	0.1420	4.315	60	8.35(1)	281.7(0.8)	0.1392
	70	11.36(1)	511.9(1.1)	0.1623		56	8.35(1)	281.5(0.8)	0.1491
	60	11.35(1)	509.5(1.2)	0.1892		50	8.33(2)	279.1(1.3)	0.1666
	50	11.25(2)	500.4(1.4)	0.2250		40	8.32(1)	275.0(0.8)	0.2080
	40	11.07(2)	482.5(1.9)	0.2767		30	8.14(3)	265.6(1.7)	0.2713
	30	10.51(3)	429.6(2.1)	0.3503		20	7.50(4)	220.9(2.0)	0.3750
4.335	60	6.76(1)	186.9(0.4)	0.1127					
	50	6.76(1)	186.9(0.5)	0.1352					
	40	6.74(1)	185.7(0.6)	0.1685					
	30	6.70(2)	183.4(0.9)	0.2233					
	20	6.38(3)	164.3(1.2)	0.3190					

Таблица 2.2 Данные компьютерного моделирования для системы с $p = 0.80$

Т	L	ξ_L	χ_L	x_L	Т	L	ξ_L	χ_L	x_L
3.51	150	26.00(4)	2580.2(8.4)	0.1733	3.52	110	16.43(2)	1051.6(2.2)	0.1494
	130	25.94(4)	2565.9(7.4)	0.1995		100	16.43(2)	1051.6(3.0)	0.1643
	110	25.71(6)	2519.1(12.4)	0.2337		90	16.39(3)	1045.1(3.6)	0.1821
	100	25.52(7)	2483.4(12.8)	0.2552		80	16.34(3)	1038.1(4.3)	0.2042
	90	25.09(10)	2391.6(19.6)	0.2788		70	16.24(3)	1026.1(3.4)	0.2320
	80	24.71(8)	2312.6(14.9)	0.3089		60	16.04(4)	999.1(5.5)	0.2673
	70	23.76(8)	2129.4(14.4)	0.3394		50	15.51(5)	929.2(6.2)	0.3102
	60	22.62(9)	1912.2(13.9)	0.3770					
3.53	100	12.48(1)	615.0(0.9)	0.1248	3.54	100	10.29(1)	422.2(0.9)	0.1029
	90	12.48(2)	615.0(1.2)	0.1387		90	10.29(1)	422.1(0.7)	0.1143
	80	12.47(2)	614.1(1.8)	0.1559		80	10.28(1)	421.3(0.9)	0.1285
	70	12.45(2)	611.9(1.6)	0.1779		70	10.28(1)	421.5(0.9)	0.1469
	60	12.40(2)	606.8(2.0)	0.2067		60	10.28(1)	421.5(0.9)	0.1713
	50	12.23(3)	589.3(2.8)	0.2446		40	10.07(3)	403.4(2.1)	0.2518
	40	11.92(3)	557.3(2.6)	0.2980		30	9.62(4)	365.5(2.8)	0.3207
3.55	70	8.81(1)	314.0(0.5)	0.1259	3.57	60	7.02(1)	201.4(0.4)	0.1170
	60	8.80(1)	312.1(0.6)	0.1467		50	7.02(1)	201.1(0.5)	0.1404
	50	8.80(1)	311.4(0.6)	0.1760		40	7.02(1)	200.9(0.7)	0.1755
	40	8.70(2)	304.4(1.1)	0.2175		30	6.95(2)	196.6(0.9)	0.2317
	30	8.40(2)	283.1(1.2)	0.2800		20	6.45(2)	168.3(0.8)	0.3225
	20	7.52(3)	222.8(1.9)	0.3760		15	5.84(1)	135.6(0.4)	0.3893

Таблица 2.3 Данные компьютерного моделирования для системы с $p = 0.60$

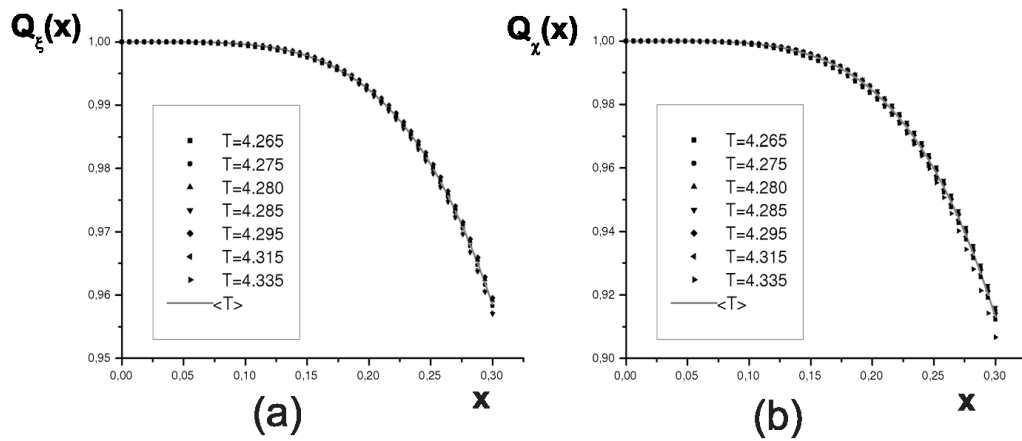
Т	L	ξ_L	χ_L	x_L	Т	L	ξ_L	χ_L	x_L
2.430	300	45.80(6)	7844.4(20.0)	0.1527	2.435	250	29.32(3)	3274.1(7.0)	0.1173
	250	45.45(8)	7738.3(28.2)	0.1818		200	29.18(3)	3247.0(7.2)	0.1459
	200	45.04(9)	7583.4(31.2)	0.2252		150	29.12(5)	3231.3(11.6)	0.1941
	140	42.86(11)	6819.0(29.0)	0.3061		130	28.91(5)	3179.4(11.7)	0.2224
	120	40.85(11)	6162.0(34.0)	0.3404		100	28.03(7)	2980.6(14.7)	0.2803
	100	38.05(11)	5301.0(23.0)	0.3805		80	26.37(7)	2622.9(13.5)	0.3296
2.440	140	22.32(2)	1921.0(3.8)	0.1594	2.445	120	18.29(2)	1301.4(3.4)	0.1524
	120	22.28(3)	1912.0(4.9)	0.1857		100	18.23(4)	1291.3(6.0)	0.1823
	100	22.07(6)	1876.3(9.7)	0.2207		90	18.14(3)	1279.5(4.8)	0.2016
	80	21.49(6)	1776.0(10.0)	0.2687		80	17.97(4)	1257.4(5.7)	0.2247
	60	20.19(8)	1551.6(12.1)	0.3366		70	17.72(4)	1219.3(6.1)	0.2532
	50	18.76(13)	1328.1(17.0)	0.3752		60	17.27(5)	1156.5(7.0)	0.2879
2.450	120	15.68(2)	964.8(1.7)	0.1307	2.460	100	12.36(1)	606.4(1.2)	0.1236
	100	15.68(3)	964.1(3.9)	0.1568		80	12.35(2)	605.7(1.8)	0.1544
	80	15.58(3)	951.9(3.6)	0.1948		70	12.32(3)	602.7(2.7)	0.1760
	60	15.16(4)	900.5(5.1)	0.2527		40	11.71(6)	540.4(5.7)	0.2927
	50	14.73(5)	846.9(5.3)	0.2945		30	10.71(5)	448.6(3.7)	0.3569
	40	13.79(4)	735.9(3.9)	0.3447					

Таблица 2.4 Данные компьютерного моделирования для системы с $p = 0.50$

T	L	ξ_L	χ_L	x_L	T	L	ξ_L	χ_L	x_L
1.851	300	49.00(15)	9015.0(56.0)	0.1633	1.854	250	36.20(10)	4992.0(26.0)	0.1448
	240	48.34(22)	8782.0(84.0)	0.2014		170	35.79(7)	4875.0(20.7)	0.2105
	200	47.50(18)	8500.0(65.0)	0.2375		150	35.32(9)	4749.0(24.0)	0.2355
	140	44.47(12)	7378.0(41.0)	0.3176		130	34.76(9)	4586.0(31.0)	0.2674
	100	39.04(16)	5608.6(42.7)	0.3904		100	32.76(10)	4046.5(26.2)	0.3276
	80	34.35(10)	4291.7(22.3)	0.4294		90	31.46(12)	3717.4(26.9)	0.3496
1.857	160	29.27(4)	3293.0(9.8)	0.1829	1.861	140	23.77(3)	2187.4(6.3)	0.1698
	140	29.04(4)	3240.1(9.8)	0.2074		120	23.59(3)	2157.4(6.2)	0.1966
	120	28.80(6)	3181.4(14.8)	0.2400		100	23.32(5)	2109.8(8.5)	0.2332
	100	28.03(6)	3002.8(14.3)	0.2803		90	22.96(6)	2042.5(10.9)	0.2551
	80	26.44(6)	2661.2(14.3)	0.3305		80	22.49(7)	1956.1(12.7)	0.2811
	60	23.24(6)	2033.0(9.2)	0.3873		70	21.88(6)	1841.3(10.4)	0.3126
1.865	140	20.15(3)	1587.5(4.6)	0.1439	1.874	120	15.35(1)	934.5(1.4)	0.1279
	120	20.13(2)	1584.7(3.7)	0.1677		110	15.33(2)	931.8(1.8)	0.1394
	100	20.01(3)	1565.9(4.7)	0.2001		100	15.33(2)	931.5(1.9)	0.1533
	90	19.89(4)	1547.8(5.9)	0.2210		80	15.27(2)	924.6(2.6)	0.1909
	80	19.62(4)	1503.8(5.7)	0.2453		60	14.91(3)	879.3(3.5)	0.2485
	70	19.19(4)	1436.2(6.1)	0.2741		50	14.41(4)	819.5(4.2)	0.2882

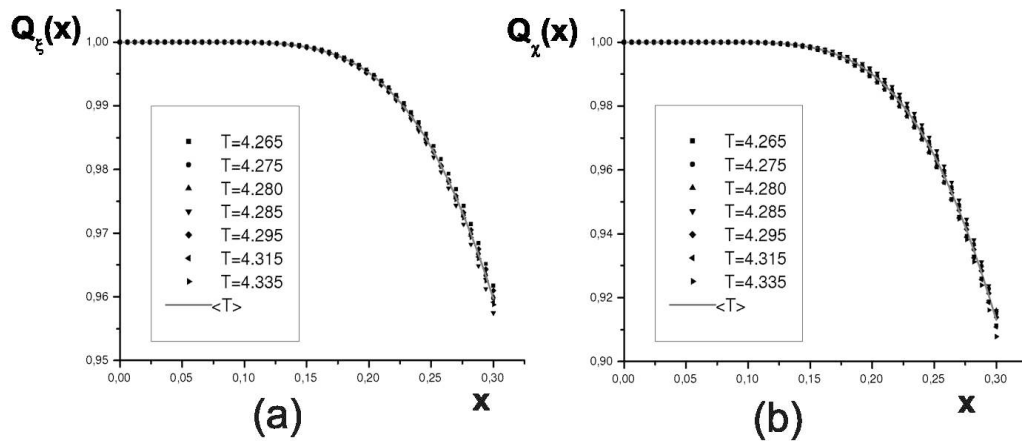
На рисунках 2.1-2.4 для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.50$ представлены скейлинговые функции для корреляционной длины ξ и восприимчивости χ , полученных для различных температур с использованием полиномиальной аппроксимации от переменной x и от переменной $\exp(-1/x)$. Из рисунков видно, что скейлинговые функции демонстрируют стремление к единой для каждой спиновой концентрации p универсальной кривой во всей области изменения скейлинговой переменной x_L . На рисунках 2.5, 2.6 представлены усредненные скейлинговые функции для корреляционной длины и восприимчивости для различных спиновых концентраций p , полученные

с использованием полиномиальной аппроксимации от x и от $\exp(-1/x)$. Усредненные скейлинговые функции демонстрируют тенденцию, указывающую на возможное существование двух классов универсального критического поведения для разбавленной модели Изинга с различным характером их поведения для слабо ($p = 0.95; 0.80$) и сильно ($p = 0.60; 0.50$) неупорядоченных систем.



a)

Рисунок 2.1 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации



a)

Рисунок 2.2 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

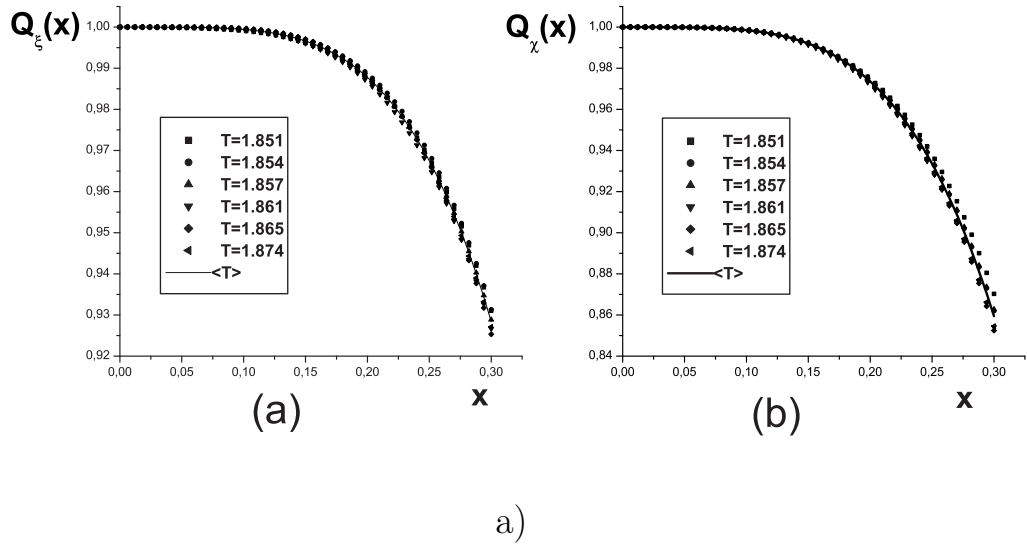


Рисунок 2.3 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.5$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации

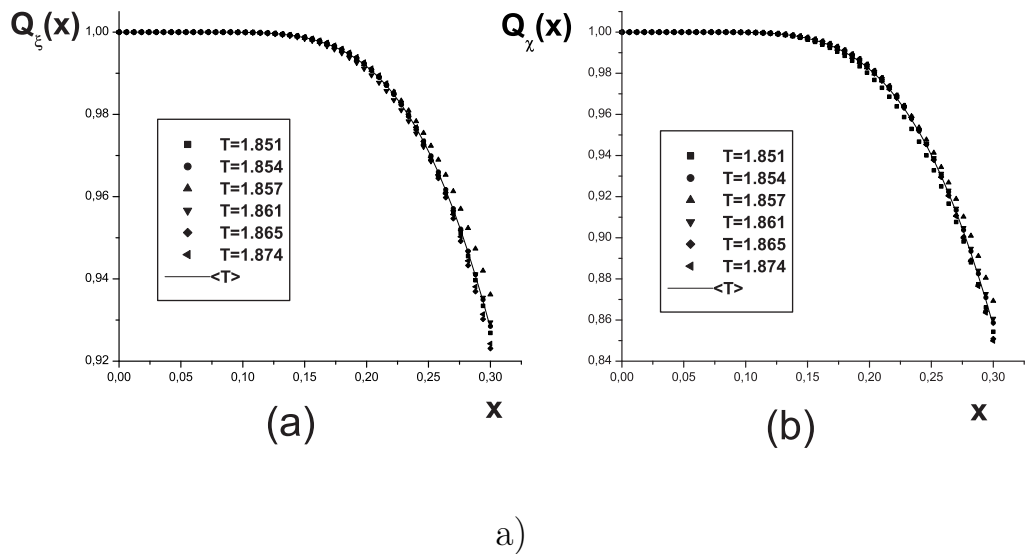
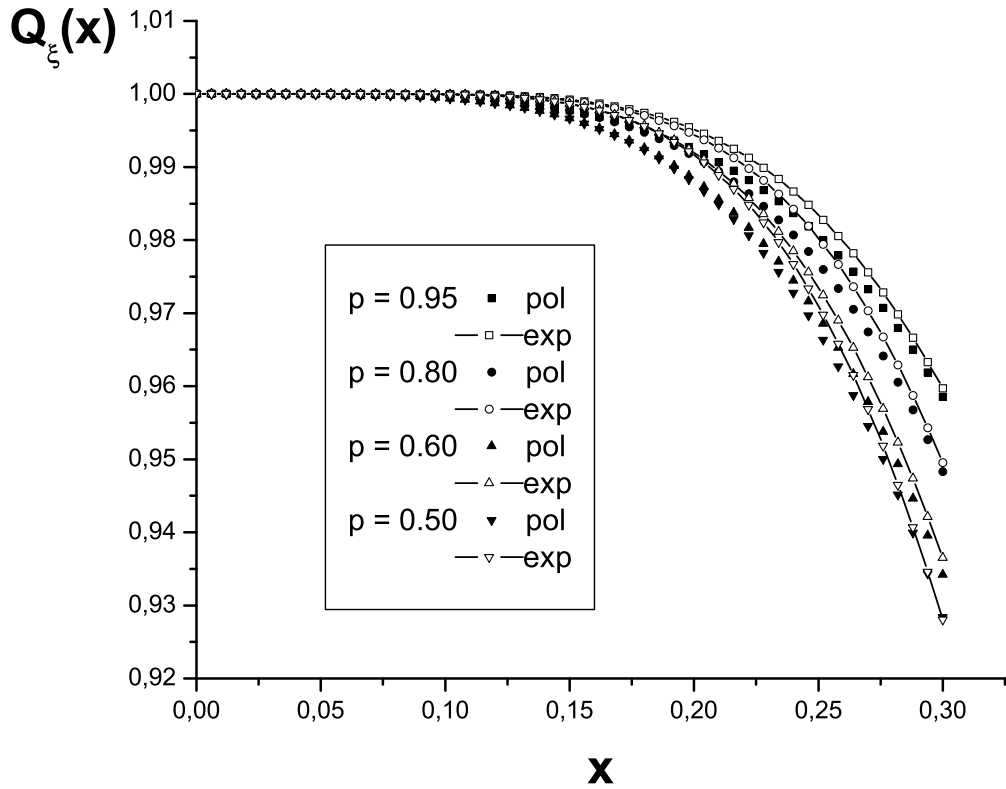


Рисунок 2.4 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.5$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

В таблице 2.5 приведены асимптотические значения $\xi(T)$ и $\chi(T)$, полученные с использованием усредненных скейлинговых функций для различных температур и различных спиновых концентраций. Погрешности значений $\xi(T)$ и $\chi(T)$ учитывают статистические погрешности измеренных величин $\xi_L(T)$ и $\chi_L(T)$ и погрешности аппроксимаций.



а)

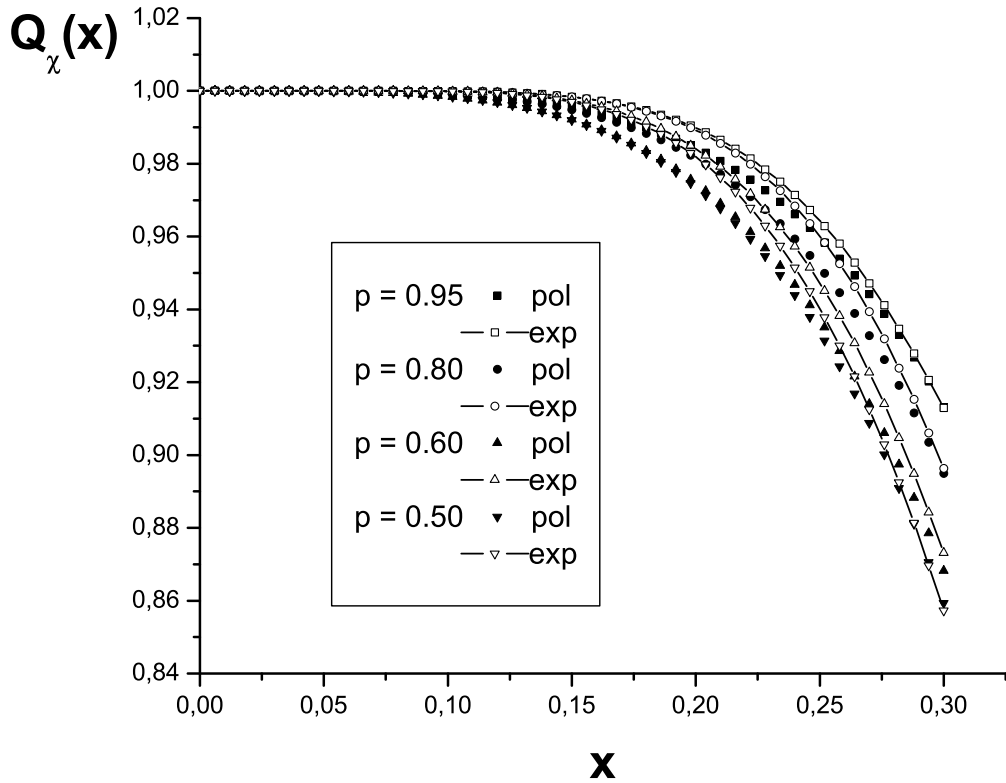
Рисунок 2.5 Усредненные скейлинговые функции для корреляционной длины, полученные с использованием полиномиальной от x (символы) и от $\exp(-1/x)$ (сплошные линии) аппроксимаций

2.3. Расчет критических характеристик

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

$$\delta = - \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln A(\tau)}{\ln |\tau|}, \quad A(\tau) = A_{\pm} |\tau|^{-\delta}, \quad (2.13)$$

где A_+ и A_- -критические амплитуды выше и ниже критической точки соответственно. Степенной закон типа (4.13) является точным лишь в пределе $\tau \rightarrow 0$. Для расчета критических индексов в промежуточном неасимптотическом режиме необходимо вводить дополнительные поправочные слагаемые к степен-



а)

Рисунок 2.6 Усредненные скейлинговые функции для восприимчивости, полученные с использованием полиномиальной от x (символы) и от $\exp(-1/x)$ (сплошные линии) аппроксимаций

ному закону (4.13). В соответствии с разложением Вегнера [120]:

$$A(\tau) = (A_0 + A_1\tau^{\omega\nu} + A_2\tau^{2\omega\nu} + \dots)\tau^{-\delta}(\tau > 0), \quad (2.14)$$

где A_i - неуниверсальные амплитуды; ω - критический индекс поправки к скейлингу. В настоящей работе для расчета характеристик критического поведения для неупорядоченных систем мы ограничились учетом ведущей первой поправки к асимптотическому поведению для корреляционной длины и восприимчивости:

$$\xi(\tau) = \tau^{-\nu}(A_0^\xi + A_1^\xi\tau^\theta), \theta = \omega\nu, \quad (2.15)$$

$$\chi(\tau) = \tau^{-\gamma}(A_0^\chi + A_1^\chi\tau^\theta), \theta = \omega\nu, \quad (2.16)$$

и провели расчет значений критических индексов ν , γ и θ , а также критических температур, используя метод наименьших квадратов для наилучшей аппрокси-

Таблица 2.5 Асимптотические значения корреляционной длины и восприимчивости, полученные при использовании скейлинговых функций с полиномиальной зависимостью от x (pol) и $\exp(-1/x)$ (exp).

p=0.95	T	4.265	4.275	4.280	4.285	4.295	4.315	4.335
ξ	pol	62.44(15)	21.25(5)	17.06(4)	14.41(3)	11.40(2)	8.37(2)	6.76(2)
	exp	62.31(15)	21.19(6)	17.02(4)	14.38(3)	11.38(2)	8.36(2)	6.76(2)
χ	pol	14467(80)	1748(16)	1130(4)	819(3)	515(2)	282(2)	187(1)
	exp	14359(81)	1724(12)	1126(5)	813(4)	513(2)	281(2)	187(1)
p=0.8	T	3.51	3.52	3.53	3.54	3.55	3.57	
ξ	pol	26.16(9)	16.50(4)	12.51(2)	10.31(2)	8.79(3)	7.01(3)	
	exp	26.11(9)	16.46(4)	12.49(3)	10.30(2)	8.76(3)	7.00(3)	
χ	pol	2612(17)	1060(5)	618(2)	424(2)	312(2)	201(2)	
	exp	2603(18)	1055(5)	615(2)	423(2)	310(2)	200(1)	
p=0.6	T	2.430	2.435	2.440	2.445	2.450	2.460	
ξ	pol	46.03(15)	29.37(7)	22.49(8)	18.33(5)	15.70(4)	12.41(4)	
	exp	45.86(13)	29.29(7)	22.40(8)	18.27(5)	15.65(5)	12.37(4)	
χ	pol	7943(55)	3289(17)	1953(15)	1308(7)	967(5)	611(4)	
	exp	7881(47)	3268(15)	1937(14)	1298(7)	961(5)	608(4)	
p=0.5	$T = 0.5$	1.851	1.854	1.857	1.861	1.865	1.87	
ξ	pol	49.55(46)	36.38(12)	29.57(9)	23.86(6)	20.23(4)	15.38(3)	
	exp	49.04(38)	36.34(16)	29.48(11)	23.81(7)	20.17(4)	15.35(3)	
χ	pol	9456(356)	5036(36)	3365(26)	2209(12)	1603(6)	939(4)	
	exp	9169(165)	5030(43)	3349(25)	2199(12)	1592(6)	934(3)	

магии данных из таблицы 2.5 выражениями 2.15 и 2.16. В таблице 2.6 представлены полученные для различных спиновых концентраций p значения критических характеристик при использовании исходных данных, соответствующих различным аппроксимациям для скейлинговых функций, а также их усредненные по аппроксимациям значения. Видно, что критические индексы образуют

две группы, близкие по значениям в пределах погрешностей вычисления: одна группа с $p = 0.95; 0.80$, т. е. для слабо неупорядоченных систем со спиновыми концентрациями p , большими порога примесной перколяции p_{imp} (для кубических систем $p_{imp} \approx 0.69$), другая с $p = 0.60; 0.50$, для сильно неупорядоченных систем с $p_c < p < p_{imp}$, где p_c - порог спиновой перколяции (для кубических систем $p_c = 0.3117$), когда в системе существуют два взаимопроникающих протекающих кластера – спиновый и примесный. Фрактальные эффекты этих двух пронизывающих друг друга кластеров могут явиться причиной изменения характера критического поведения для сильно неупорядоченных систем.

Таблица 2.6 Значения критических характеристик для двух типов аппроксимаций (pol) и (exp) и их усредненные (aver) значения для систем с различными

спиновыми концентрациями p

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

Таблица 2.7 Значения критических температур для неупорядоченных систем с различными спиновыми концентрациями p

p	T_c
0.95	4.26267(4)
0.8	3.49948(18)
0.6	2.42413(9)
0.5	1.84509(6)

2.4. Основные результаты и выводы

В качестве итоговых можно рассматривать усредненные значения критических индексов $\nu = 0.693(5)$, $\gamma = 1.342(7)$, $\theta = 0.157(92)$ для слабо неупорядоченных систем и $\nu = 0.731(11)$, $\gamma = 1.422(12)$, $\theta = 0.203(106)$ для сильно неупорядоченных систем. Отметим, что полученные значения критических индексов для слабо неупорядоченных систем хорошо соотносятся со значениями $\nu = 0.678(10)$, $\gamma = 1.330(17)$, $\theta = 0.170(71)$ ($\omega = 0.25(10)$), полученными в [121] ренормгрупповыми методами в шестипетлевом приближении и справедливыми лишь для систем с малыми концентрациями примесей. В таблице 2.7 приведены рассчитанные значения критических температур для неупорядоченных систем с различными спиновыми концентрациями p .

Таблица 2.8 Экспериментально измеренные значения критических индексов материалах, соответствующих неупорядоченной модели Изинга

Авторы	$Fe_pZn_{1-p}F_2$	$ \tau $	ν	γ
Birgeneau et al., 1983, [76]	$p=0.6$	$10^{-1} - 2 \cdot 10^{-3}$	0.73(3)	1.44(6)
	$p=0.5$	$2 \cdot 10^{-2} - 1.5 \cdot 10^{-3}$		
Belanger et al., 1986, [125]	$p=0.46$	$10^{-1} - 10^{-3}$	0.69(1)	1.31(3)
Slanic et al., 1999, [126]	$p=0.93$		0.71(1)	1.35(1)
	$p=0.93$	$10^{-2} - 1.14 \cdot 10^{-4}$	0.70(2)	1.34(6)
Mitchell et al., 1986, [128]	$Mn_pZn_{1-p}F_2$			
	$p=0.75$	$2 \cdot 10^{-1} - 4 \cdot 10^{-4}$	0.715	1.364(76)
	$p=0.50$	$10^{-1} - 5 \cdot 10^{-3}$	0.75(5)	1.57(16)

Полученные значения критических индексов ν и γ находятся также в до-

Таблица 2.9 Значения критических индексов, полученные моделированием методом Монте-Карло

Авторы	L_{max}	p	ν	γ	$\theta = \omega\nu$
Wang et al., 1990, [129]	300	0.8		1.36(4)	
Heuer, 1993, [122]	60	0.95	0.64(2)	1.28(3)	
		0.9	0.65(2)	1.31(3)	
		0.8	0.68(2)	1.35(3)	
		0.6	0.72(2)	1.51(3)	
Wiseman et al., 1998, [130]	64	0.8	0.682(3)	1.357(8)	
	80	0.6	0.717(7)	1.508(28)	
Ballesteros et al., 1998, [124],	128	$0.4 \leq p \leq 0.9$	0.6837(53)	1.342(10)	0.253(43)
Calabrese et al., 2003, [76, 98]	0.8	0.683(3)	1.336(8)	0.581(85)	
Berche et al., 2005, [119]	96	0.85	0.662(2)	1.314(4)	
Мургазаев и др., 2004, [17]	60	0.95	0.646(2)	1.262(2)	
		0.9	0.664(2)	1.285(3)	
		0.8	0.683(4)	1.299(3)	
		0.6	0.725(6)	1.446(4)	

статочном согласии с имеющимися результатами экспериментальных исследований разбавленных изингоподобных магнетиков (Таблица 2.8). В таблице 2.9 представлены наиболее современные результаты исследований, проведенных различными авторами по моделированию методом Монте-Карло критического поведения разбавленной модели Изинга. В каждой из цитируемых работ есть как свои достоинства, связанные с использованием различных методик обработки результатов моделирования, так и свои недостатки, связанные или с малыми размерами рассматриваемых решеток, что не обеспечивает надежного определения асимптотических значений измеряемых величин, или с недостаточной статистикой усреднения по различным примесным конфигурациям для получения достоверных результатов, или с тем, что не учитывается влияние неасимптотических поправок к скейлингу при проведении процедуры расчета критических индексов, необходимость учета которых особенно важна для образцов со спиновыми концентрациями $p = 0.95; 0.80$ и сильно неупорядоченных систем. Результаты работ [17, 122] можно рассматривать как поддерживающие выводы, идеи которых были высказаны нами еще в ранних работах [123] по компьютерному моделированию критической динамики неупорядоченной модели Изинга. Авторы работы [124] при всей привлекательности поддерживаемой ими идеи о едином универсальном критическом поведении с асимптотическими значениями критических индексов, не зависящими от спи-

новой концентрации, не смогли на самом деле адекватно объяснить полученные ими результаты для образцов с $p = 0.90$ при использовании единого для всех систем критического индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.37(6)$, хотя полученные в [124] неасимптотические значения критических индексов демонстрировали явную зависимость от p и позволяли при отказе от единого ω получить два набора асимптотических критических индексов для слабо и сильно неупорядоченных систем. Результаты остальных работ, выполненные на образцах лишь с единственной спиновой концентрацией, как правило в пределах погрешности, перекрываются с нашими результатами, хотя есть и несоответствия, обусловленные скорее всего недостатками, высказанными выше.

2.5. Нули статистической суммы и критическое поведение трехмерной неупорядоченной модели Изинга

2.5.1. Метод и вычисляемые величины

В статистической механике статистическая сумма Z определяет статистические свойства системы в термодинамическом равновесии. Полная энергия, свободная энергия, энтропия, могут быть выражены через статистическую сумму или через ее производные. Когда система претерпевает фазовый переход, свободная энергия становится сингулярной. В 1952 году Янг и Ли [131, 132] предложили метод для исследования фазовых переходов при помощи нулей статистической суммы в комплексной области (нули Янга-Ли). В своих основополагающих работах они доказали теорему, которая утверждает, что для модели Изинга комплексные нули статистической суммы расположены на окружности единичного диаметра на комплексной плоскости и в термодинамическом пределе система претерпевает фазовый переход только в том случае, когда распределение нулей Янга-Ли на комплексной плоскости пересекает положительную действительную ось. Позже Фишер [133] предложил рассмотреть статистическую сумму, как функцию от комплексной температуры. Нули статистической суммы (нули Фишера) определяются соотношением $Z(\beta) = Z(\eta + i\xi) = 0$, где $\beta = 1/T$. Статистическую сумму можно представить в виде полинома от $u = \exp(-4\beta)$. При фазовом переходе в термодинамическом пределе ($L \rightarrow \infty$) все комплексные нули стремятся к $\beta_c(\infty)$. В работе [135], используя соотноше-

ния $Re(u_c - u)$ and $Im(u) \sim aL^{-1/\nu}$ определили критический индекс корреляционной длины ν трехмерной модели Изинга. Статистическая сумма определяется выражением

$$Z(\beta) = \sum_{S_i} \exp(-\beta E) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-\beta E), \quad (2.17)$$

где $p(E, \beta)$ плотность состояний. Комплексные нули статистической суммы указывают сингулярное поведение свободной энергии. Рассматривая статистическую сумму, как функцию комплексной температуры $\beta = \eta + i\xi$ [133].

$$Z(\beta) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta + i\xi)E) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta E)[\cos(\xi E) - i\sin(\xi E)]) \quad (2.18)$$

Определяя величину R пропорциональную $Z[Re(\beta)]$ в виде [135]:

$$R = \frac{Z(\beta)}{Z[Re(\beta)]} = \frac{\sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta + i\xi)E)}{\sum_E p(E, \beta) \exp(-\eta E)} = \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta - i \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta, \quad (2.19)$$

где $\langle \cos(\xi E) \rangle_\eta$ и $\langle \sin(\xi E) \rangle_\eta$ вычисляются при действительной температуре $\beta = \eta$. Нули Фишера есть комплексные величины (η, ξ) , которые можно найти из условия $R = 0$. Выполняя моделирование при критической температуре (β_c) величины $\langle \cos(\xi E) \rangle_\eta$ и $\langle \sin(\xi E) \rangle_\eta$ можно вычислить используя гистограммную технику [134, 135]:

$$\langle \cos(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \cos(\xi E) H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}{\sum_E H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}, \quad (2.20)$$

$$\langle \sin(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \sin(\xi E) H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}{\sum_E H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}, \quad (2.21)$$

где $H_{\beta_c}(E)$ -число состояний с энергией E (гистограмма энергии). Находя минимум $R^2 = \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta^2 + \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta^2$ определим нули статистической суммы (η, ξ) .

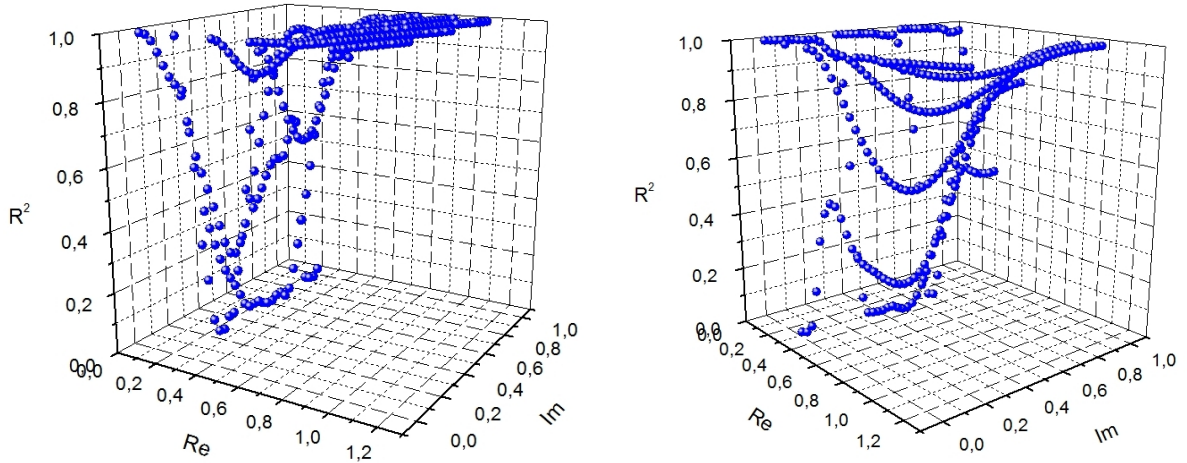


Рисунок 2.7 R^2 как функция действительной и мнимой части β для $L = 18$ при спиновой концентрации $p = 0.95$ и $p = 0.8$.

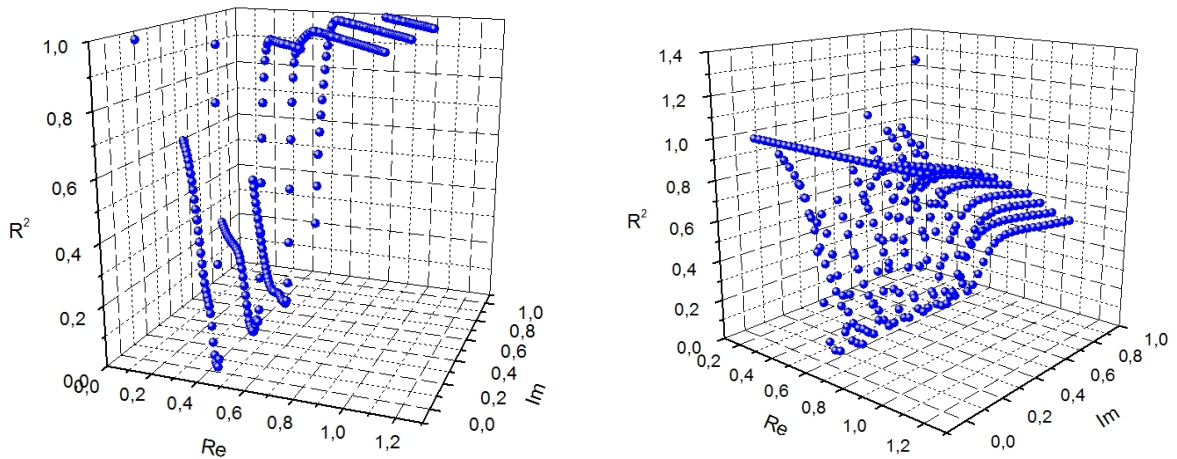


Рисунок 2.8 R^2 как функция действительной и мнимой части β для $L = 18$ при спиновой концентрации $p = 0.6$ и $p = 0.5$.

2.5.2. Параметры моделирования и результаты

В данной работе мы выполнили моделирование методом Монте-Карло критического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга с концентрациями спинов $p = 0.95, 0.80, 0.60, 0.50$ и линейными размерами $L = 18 - 32$. При моделировании использовались периодические граничные условия. За один Монте-Карло шаг на спин (MCS) бралось десять переворотов кластеров Вольфа. Для установления равновесия выполнялись 10^6 MCS и $2 \cdot 10^6$ использовались для усреднения. Для определения средних значений термодинамических функций проводилось усреднение по 400 примесным конфигу-

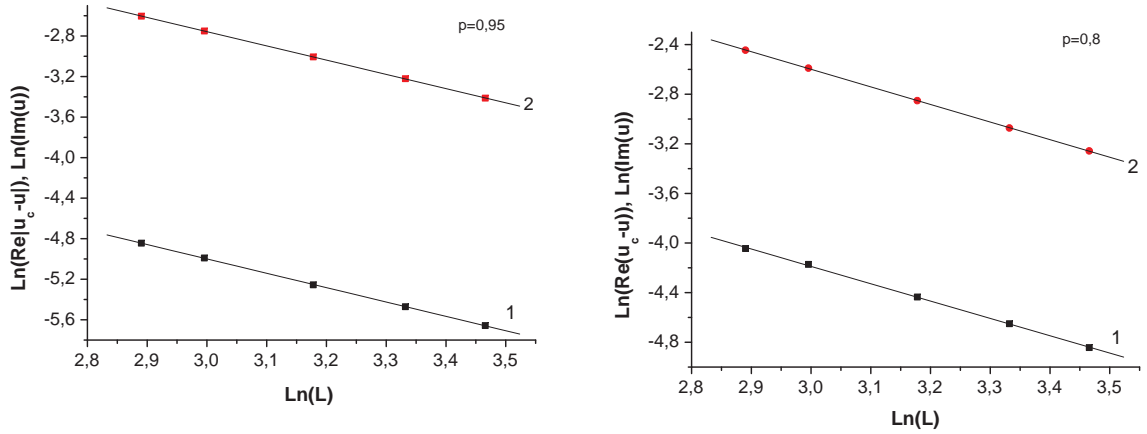


Рисунок 2.9 Действительная часть 1 и мнимая часть 2 первого нуля Фишера для концентрации спинов $p = 0.95$ и $p = 0.8$ как функция размера решетки L

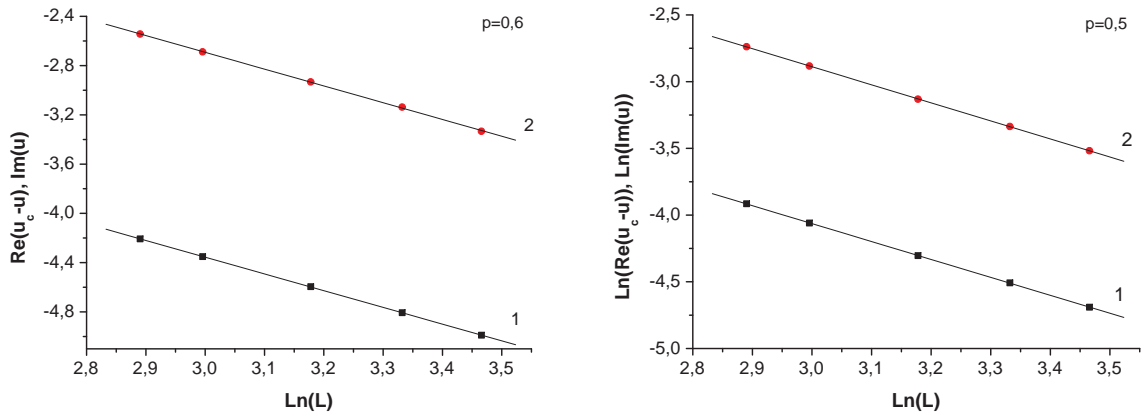


Рисунок 2.10 Действительная часть 1 и мнимая часть 2 первого нуля Фишера для концентрации спинов $p = 0.6$ и $p = 0.5$ как функция размера решетки L

рациям. Так как, нас интересует поведение систем вблизи критической температуры моделирование осуществлялось при β_c , которые были определены в [102] ($\beta_c(0.95) = 0.2345947(2)$, $\beta_c(0.8) = 0.285757(2)$, $\beta_c(0.6) = 0.412519(3)$ и $\beta_c(0.5) = 0.541979(3)$). На рисунках 2.7,2.8 показаны примеры зависимостей R^2 от действительной и мнимой части β . Используя метод Хука-Дживса были определены наименьшие по модулю комплексные нули статистической суммы трехмерной неупорядоченной модели Изинга для $L = 18, 20, 24, 28, 32$. Для определения критического индекса ν с учетом поправок к скейлингу были использованы конечно-размерные соотношения:

$$Re(u_c - u), Im(u) \sim aL^{-1/\nu}(1 + bL^{-\omega}), \quad (2.22)$$

где ω -индекс поправки к скейлингу, определенный в [102] $\omega(0.95), \omega(0.8) = 0.23(13)$ и $\omega(0.6), \omega(0.5) = 0.28(15)$. На рисунках 2.9, 2.10 представлены зависимости действительных и мнимых частей первых нулей (наименьших по модулю) статистической суммы от размера решетки в двойном логарифмическом масштабе.

С учетом поправок к скейлингу были получены следующие значения критического индекса корреляционной длины: $\nu(0.95) = 0.705(5)$, $\nu(0.8) = 0.711(6)$, $\nu(0.6) = 0.736(6)$ и $\nu(0.5) = 0.744(6)$.

Полученные значения индекса указывают на существования двух классов универсальности для неупорядоченной трехмерной модели Изинга.

2.6. Выводы

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- применение суперкомпьютерных технологий при моделировании методами Монте-Карло критического поведения структурно неупорядоченных систем позволило для вычисления скейлинговых функций термодинамических величин и значений равновесных и динамических критических индексов использовать усреднение по большому количеству примесных конфигураций (от 3000 - до 50000) и широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20 - 400$. Все это позволяет считать, что полученные результаты носят уникальный характер.

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

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

- результаты моделирования согласуются с результатами экспериментальных исследований критического поведения неупорядоченных изингоподобных магнетиков.

Глава 3

**Исследование низкотемпературного поведения неупорядоченного
антиферромагнетика со случайными полями методом
параллельного отжига**

Для описания влияния случайных полей на поведение магнитных систем используются две модели: ферромагнитная модель Изинга со случайным магнитным полем (RFIM) [127, 136, 137] и неупорядоченная антиферромагнитная модель Изинга во внешнем однородном поле (DAFF) [138]. Реальные магнитные системы с эффектами случайных полей являются антиферромагнетиками с замороженными примесями немагнитных атомов, в поведении которых наряду с антиферромагнитным взаимодействием ближайших атомов проявляются эффекты влияния ферромагнитного взаимодействия атомов, следующих за ближайшими. В модели DAFF не учитывается конкуренция ферромагнитного взаимодействия, поэтому область ее реального применения, как и модели RFIM, довольно ограничена. Структура антиферромагнетика можно представить в виде нескольких ферромагнитных подрешеток, вставленных друг к другу таким образом, суммарная намагниченность антиферромагнетика остается равной нулю, несмотря на то, что при температуре ниже температуры Нееля в рамках каждой ферромагнитной подрешетки происходит магнитное упорядочение. Примером двухподрешеточных антиферромагнетиков являются следующие материалы: NiO , MnO , Fe_2O_3 , MnF_2 и др. В качестве примеров реализации неупорядоченных систем со случайными магнитными полями можно привести кристаллические одноосные изингподобные антиферромагнетики MnF_2 , FeF_2 с примесями атомов цинка Zn во внешнем магнитном поле. В работах [145, 146] в результате компьютерного моделирования методом Монте-Карло термодинамического поведения неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных магнитных полей впервые было показано, что для слабо неупорядоченных систем со спиновой концентрацией выше порога примесной перколяции реализуется фазовый переход второго рода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние. Для сильно неупорядоченных систем со спиновой концентрацией ниже данного порогового значения в системе осуществляется фазовый переход первого рода из парамагнитного в смешанное состояние, характеризующееся сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-

стекольной фазы. Было показано, что с понижением спиновых концентраций и увеличением величины внешнего магнитного поля в системе осуществляется сокращение числа и размеров антиферромагнитных доменов и увеличение числа и размеров ферромагнитных доменов при сокращении относительного объема спин-стекольной фазы. В данной области спиновых концентраций эффекты случайных магнитных полей приводят к смене антиферромагнитного основного состояния на спин-стекольное.

Как известно, спин-стекольное состояние характеризуется наличием большого числа метастабильных энергетических состояний, разделенных потенциальными барьерами. Число метастабильных состояний экспоненциально растет с увеличением числа спинов, что сильно затрудняет численное моделирование таких систем. В спиновых стеклах существует проблема достижения их равновесных состояний. Причиной тому являются высокие энергетические барьеры, разделяющие локальные минимумы энергии. При достаточно низких температурах система может никогда не покинуть локальный энергетический минимум, даже если соответствующее состояние является глобально неустойчивым. Эта особенность делает невозможным получение физических характеристик для магнетиков, содержащих, как в нашем случае, спин-стекольную фазу, при использовании стандартных алгоритмов Монте-Карло. Возникает необходимость в улучшении или модификации применяемых при моделировании алгоритмов. Одним из алгоритмов, позволившим решить эту проблему, стал алгоритм параллельного отжига [143]. В данной главе рассматривается та же, что и в [145, 146], антиферромагнитная модель Изинга с концентрацией спинов $p = 0,5$, соответствующей области сильного неупорядочения. Задача – получить подтверждение существования для подобной системы спин-стекольного основного состояния и сложной доменной структуры путем реализации и применения для ее численного исследования алгоритма метода параллельных температур, разработанного специально для изучения термодинамики спиновых стекол. Результаты исследований опубликованы в работах [104, 106, 139–142] и получены совместно с В.В.Прудниковым. Личный вклад автора заключается в получении большей части методических результатов и в проведении значительной части расчетов, анализе и интерпретации полученных данных и написании статей и является определяющим. Е.Л. Филиканов принимал участия в обработке результатов моделирования.

3.1. Модель и вычисляемые величины

Неупорядоченная двухподрешеточная антиферромагнитная модель Изинга определялась как система спинов с концентрацией p , связанных с $N = pL^3$ узлами кубической решетки с наложенными периодическими граничными условиями. Гамильтониан исследуемой модели имеет вид:

$$H = J_1 \sum_{i,j} p_i p_j \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{i,k} p_i p_k \sigma_i \sigma_k + h \sum_i \sigma_i, \quad (3.1)$$

где $\sigma_i = \pm 1$, $J_1 = 1$ характеризует антиферромагнитное взаимодействие спинов с ближайшими соседями, $J_2 = -1/2$ характеризует ферромагнитное взаимодействие с соседями, следующими за ближайшими, h – напряженность однородного магнитного поля. Случайные переменные p_i, p_j описываются функцией распределения

$$P(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p)\delta(p_i), \quad (3.2)$$

и характеризуют распределенные по узлам решетки замороженные термодинамические величины, как полная намагниченность

$$M = \frac{1}{pL^3} [\langle \sum_i \sigma_i \rangle], \quad (3.3)$$

"Шахматная намагниченность" $M_{stg} = M_1 - M_2$ (M_1, M_2 – намагниченности подрешеток), спин-стекольный параметр порядка

$$q_{\alpha,\beta} = \frac{1}{pL^3} [\sum_i \langle p_i \sigma_i \rangle_{(\alpha)} \langle p_i \sigma_i \rangle_{(\beta)}], \quad (3.4)$$

где индексы α, β характеризуют различные реплики неупорядоченной системы, моделируемые одновременно при одной и той же температуре и отличающиеся различными начальными конфигурациями. Угловые скобки обозначают статистическое усреднение, осуществляемое для каждой примесной конфигурации системы, а квадратные скобки – усреднение по различным примесным конфигурациям. Данные величины $M, M_{stg}, q_{\alpha,\beta}$ характеризуют различные типы магнитного упорядочения сильно неупорядоченной системы, которые могут возникать в ней в низкотемпературной фазе. Наряду с данными магнитными

термодинамическими величинами, проводилось измерение теплоемкости как тепловой характеристики происходящих фазовых превращений в системе.

3.2. Метод параллельного отжига

Метод параллельного отжига является расширением обычного алгоритма Метрополиса. Оптимизация заключается в добавлении к алгоритму Метрополией второй марковской цепи по температурному параметру $\beta = J_1/T$. Новый закон распределения запишется в виде:

$$P(\{\delta\}, \{\beta_\alpha\}) \sim \exp(-\beta_\alpha H(\{\delta\}) + g_\alpha), \quad (3.5)$$

где g_α — некоторая константа. Каждому β_α соответствует свое g_α . Вероятность изменения динамического параметра β_α будет подчиняться закону: $\exp(-S)$, где

$$S = (\beta'_\alpha - \beta_\alpha) H(\{\delta\}) + (g'_\alpha - g_\alpha). \quad (3.6)$$

В случае одновременного моделирования реплик системы для каждого β_α с $\alpha = 0 \dots N$ изменение температуры может определяться только ближайшими значениями α , т. е. $\beta'_\alpha = \beta_{\alpha \pm 1}$. Вероятность перехода между состояниями, определяемыми соседними температурами, запишется в виде $\exp(-\Delta S)$, где ΔS задается выражением:

$$\Delta S = S' - S = (E_{\beta_\alpha} - E_{\beta_{\alpha+1}}) (\beta_{\alpha+1} - \beta_\alpha) \quad (3.7)$$

В соответствии с особенностью данного алгоритма температура системы может в процессе моделирования как уменьшаться (отжиг системы), так и увеличиваться, что позволяет системе преодолевать высокие потенциальные барьеры.

Основным критерием применения метода параллельных температур является перекрытие функций распределения энергии реплик системы для соседних температур (рисунок 3.1). Т.к. с понижением температуры дисперсия энергии стремится к нулю, выбор равноотстоящих температур не является оправданным, интервал между соседними температурами $\delta T = T_{\alpha+1} - T_\alpha$ также должен уменьшаться. Данная зависимость накладывает дополнительные трудности на моделирование поведения систем в области низких температур, т.к. началь-

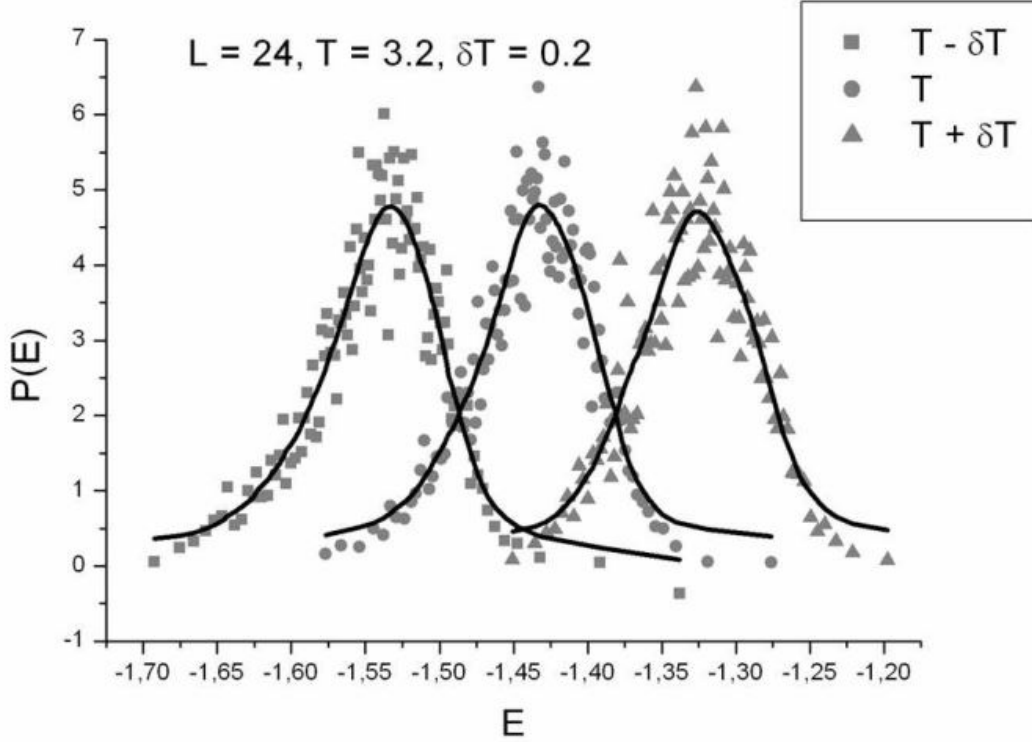


Рисунок 3.1 Перекрывание распределений энергии для соседних реплик.

ная максимальная температура моделирования T_N должна быть достаточно большой для преодоления потенциальных барьеров, разделяющих локальные минимумы энергии. Между тем, число рассматриваемых при моделировании реплик системы (при различных температурах) должно обеспечивать механизм обмена температурами. В условиях конечного числа моделируемых реплик, ограниченного вычислительными ресурсами исследователя, необходимо решить задачу оптимального выбора ряда рассматриваемых температур. Теоретически, наиболее оптимальным, согласно [147], является выбор температур, при котором вероятность перехода реплики к новой температуре является постоянной величиной для всего набора реплик:

$$P(E_\alpha, \beta_\alpha \rightarrow E_{\alpha+1}, \beta_{\alpha+1}) = \min [1, \exp(-\Delta S)] \simeq \text{const} \quad (3.8)$$

В качестве оптимального ряда температур можно воспользоваться геометрической прогрессией $T_{\alpha+1}/T_\alpha = \text{const}$:

$$T_\alpha = T_0 R^\alpha (\alpha = 0 \dots N), \quad (3.9)$$

где $R = \sqrt[N]{T_N/T_0}$. Выбор температурного ряда в таком виде обеспечивает выполнение равенства (3.8). В работе [147] было определено оптимальное значение вероятности перехода реплики к новой температуре при реализации алгоритма параллельных температур: $P \simeq 0.23$.

Однако, в отличие от изинговских спиновых стекол, в которых температура перехода в спин-стекольное состояние $T_f/J \approx 1$, в разбавленной антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных магнитных полей при исследуемой спиновой концентрации $p = 0,5$ температура фазового перехода в смешанное состояние $T_m \approx 5$ в единицах обменного интеграла J_1 . В результате, применение метода параллельных температур к моделированию такой системы требует охвата значительно более широкого диапазона температур. Так, для гарантированного получения стабильного начального равновесного состояния, с которого лучше осуществлять моделирование, начальная максимальная температура T_N должна быть выбрана значительно выше температуры T_m и лишь затем можно исследовать фазовый переход в смешанное состояние вблизи T_m , в окрестности которой уже возникает совокупность метастабильных состояний с чрезвычайно медленной динамикой установления равновесия.

С другой стороны, для исследования асимптотического приближения к основному спин-стекольному состоянию системы желательно, чтобы минимальная температура T_0 была как можно ближе к $T = 0$. Все это накладывает новые требования к реализации алгоритма параллельных температур к исследованию неупорядоченного антиферромагнетика и к выбору температурного ряда для моделируемых реплик.

Отметим также, что для реализации условия равной вероятности обмена температурами между соседними репликами необходимо иметь информацию о температурной зависимости энергии системы $E(T)$ и вследствие этого процедура выделения оптимального набора температурных точек требует предварительного моделирования исследуемой системы. В качестве первого приближения можно выбрать температурный ряд в виде геометрической прогрессии (3.9). Последующее моделирование системы для выбранных температур дает представление о зависимости $E(T)$ (также в первом приближении). На следующем шаге определяется новый набор температур β'_α согласно условию (3.8):

$$(E(\beta'_\alpha) - E(\beta'_{\alpha+1}))(\beta'_{\alpha+1} - \beta'_\alpha) \simeq \text{const} \quad (3.10)$$

Получаемый при этом новый набор температур задает более оптимальные параметры моделирования неупорядоченной системы. В свою очередь, получаемое распределение реплик по температурам также представляет собой приближение (второго порядка), которое можно использовать для последующего итерационного поиска оптимального набора температур.

Неудобством данного подхода является необходимость каждый раз заново проводить «полное» моделирование системы на каждом шаге поиска оптимального ряда температур. Тем не менее, данный подход позволяет наиболее эффективно использовать алгоритм параллельного отжига в проведении численного эксперимента по исследованию низкотемпературных свойств спин-стекольных состояний.

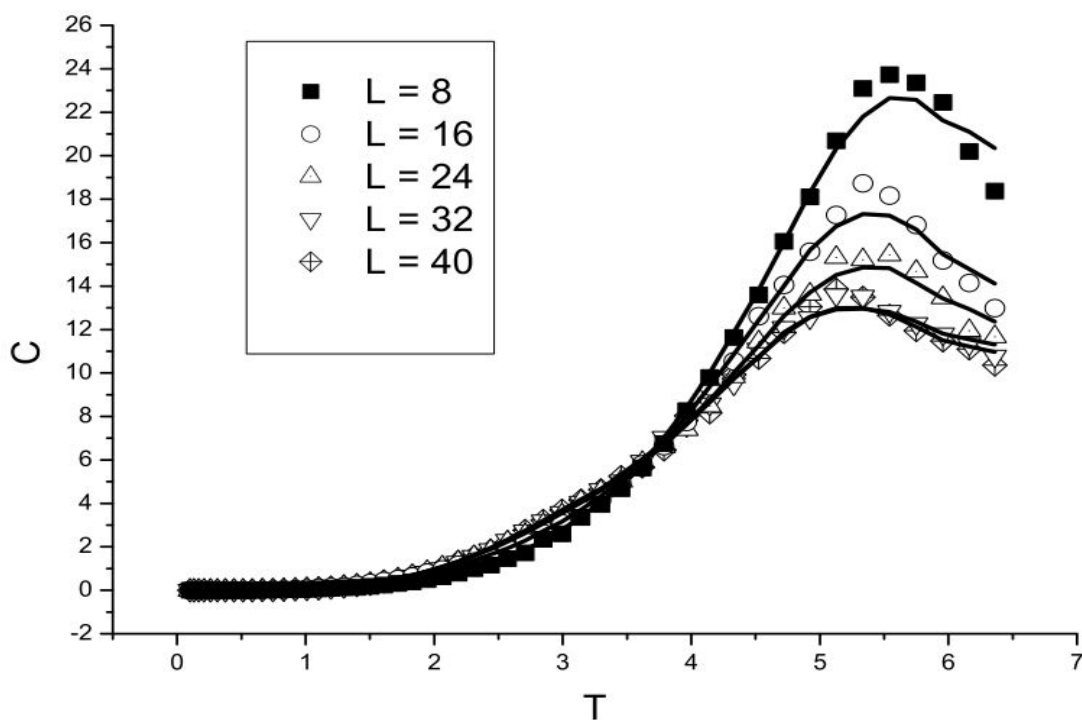


Рисунок 3.2 Температурная зависимость теплоемкости C для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

3.3. Результаты моделирования и их обсуждение

В данной работе рассматривалась антиферромагнитная модель Изинга с концентрацией спинов $p = 0.5$, соответствующей области сильного неупорядочения, и напряженностью магнитного поля $h = 2$. Моделирование проводи-

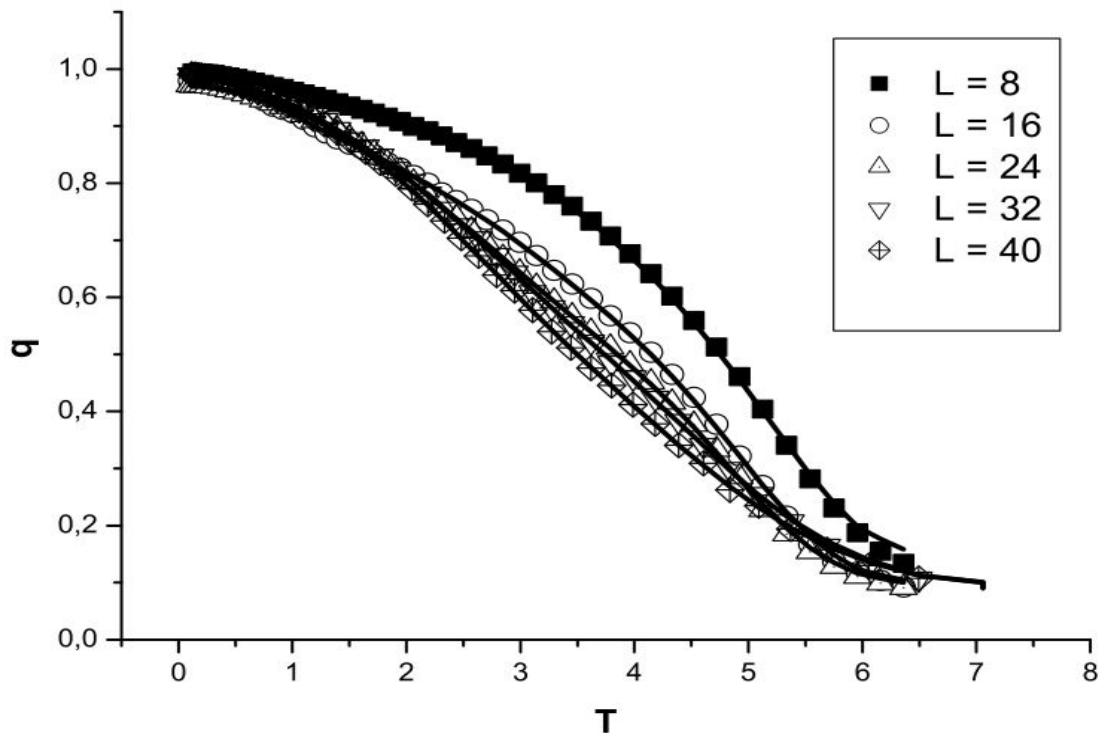


Рисунок 3.3 Температурная зависимость спин-стекольного параметра порядка q для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

лось для широкого набора значений линейных размеров кубической решетки $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

Для определения температуры фазового перехода в системе и интервалов существования различных фазовых состояний была измерено температурное поведение теплоемкости системы (рисунок 3.2) для решеток указанных выше размеров. Видно, что в температурном интервале $T = 4,5 - 6,5$ наблюдается аномальное увеличение теплоемкости, указывающее на происходящий в системе фазовый переход. Размерные изменения в поведении теплоемкости указывают на подавление флуктуаций энергии в системе по сравнению с типичными фазовыми переходами второго рода в антиферромагнитное состояние, а излом температурной $C(T)$ при $T_m = 5,13$ для решетки с $L_{max} = 40$ является характерным для фазового перехода в спиновых стеклах [144].

Для получения равновесных магнитных характеристик системы выбирались начальные состояния в парамагнитной фазе. Этот выбор обусловлен тем, что вблизи температуры перехода и во всей низкотемпературной фазе из-за наличия метастабильных состояний возникает проблема получения равновес-

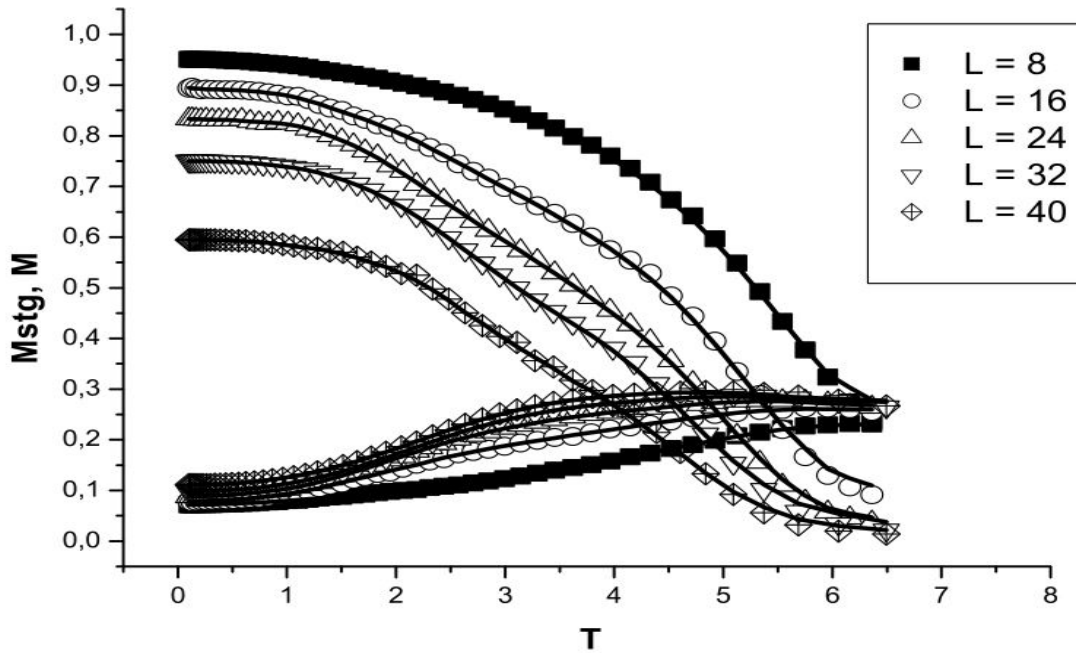


Рисунок 3.4 Температурная зависимость шахматной M_{stg} и полной M намагниченностей для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $l = 8, 16, 24, 32, 40$.

ных начальных конфигураций. Полученные начальные состояния использовались при реализации метода параллельных температур. В рамках этого метода выбирался первоначальный набор температур по формуле (3.9). Полученная в ходе моделирования температурная зависимость энергии $E(T)$ использовалась для уточнения температур β_α по принципу равной вероятности перехода между соседними температурами. Для достижения равновесного состояния системы при каждой температуре на релаксацию отводилось 10^4 шагов Монте-Карло с отбрасыванием при этом половины начальных конфигураций.

На рисунках 3.3 – 3.4 приведены полученные температурные зависимости для шахматной M_{stg} и полной M намагниченностей и спин-стекольного параметра порядка q для решеток с линейными размерами от $L = 8$ до $L = 40$, усредненные по 100 различным примесным конфигурациям.

Из рисунков видно, что все измеренные величины демонстрируют заметную зависимость от размеров системы. Наиболее сильной размерной зависимостью от L характеризуется шахматная намагниченность, которая для систем малых размеров задает доминирующее магнитное упорядочение антиферро-

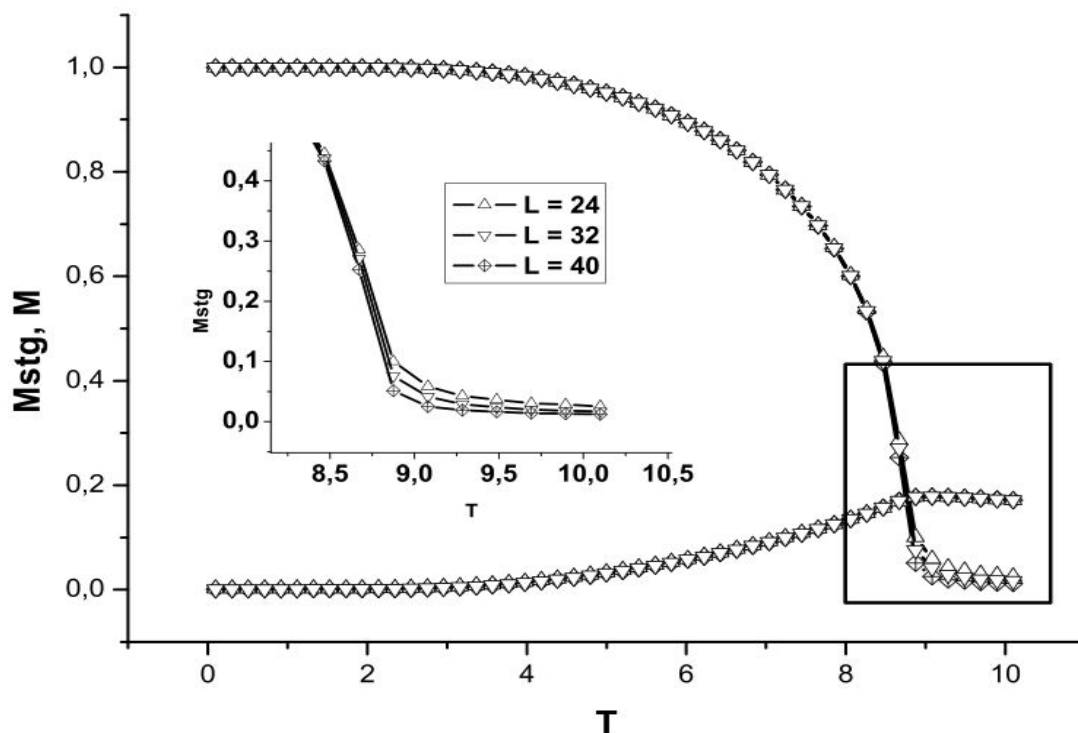


Рисунок 3.5 Температурная зависимость шахматной M_{stg} и полной M намагниченностей для систем со спиновой концентрацией $p = 0.90$ и линейными размерами $L = 24, 32, 40$. На вставке для M_{stg} выделена температурная область фазового перехода.

магнитной природы, при этом спин-стекольный параметр порядка выступает вторичным параметром упорядочения и повторяет температурную зависимость «шахматной» намагниченности. Сильное уменьшение M_{stg} с ростом L при заметно меньших изменениях спин-стекольного параметра порядка указывает на преобладание в системе при $L > 24$ спин-стекольного упорядочения и на возникновение в низкотемпературной фазе смешанного фазового состояния из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, окруженных спин-стекольной фазой. Полученные результаты указывают что в пределе $L \rightarrow \infty$ и $T \rightarrow 0$ в системе реализуется спин-стекольное основное состояние.

Для сопоставления наблюдаемых особенностей поведения магнитных характеристик модели в области сильного структурного беспорядка с поведением аналогичных характеристик в области слабого неупорядочения нами было проведено аналогичное исследование для образцов со спиновой концентрацией $p = 0.9$. На рисунке 3.5 приведены графики температурного изменения «шахматной» M_{stg} и полной M намагниченностей для линейных размеров решетки $L = 24, 32, 40$. Видно, что размерная зависимость данных характеристик

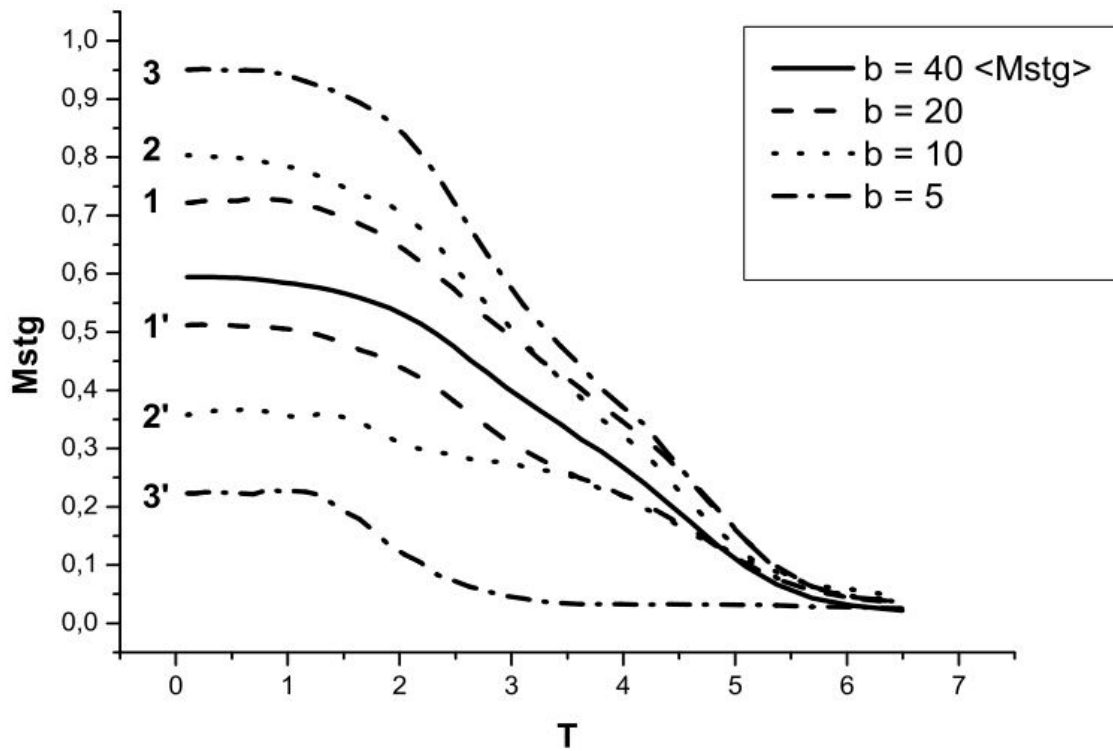


Рисунок 3.6 Температурная зависимость локальных значений шахматной намагниченности M_{stg} для блоков с размерами $b = 5, 10, 20$.

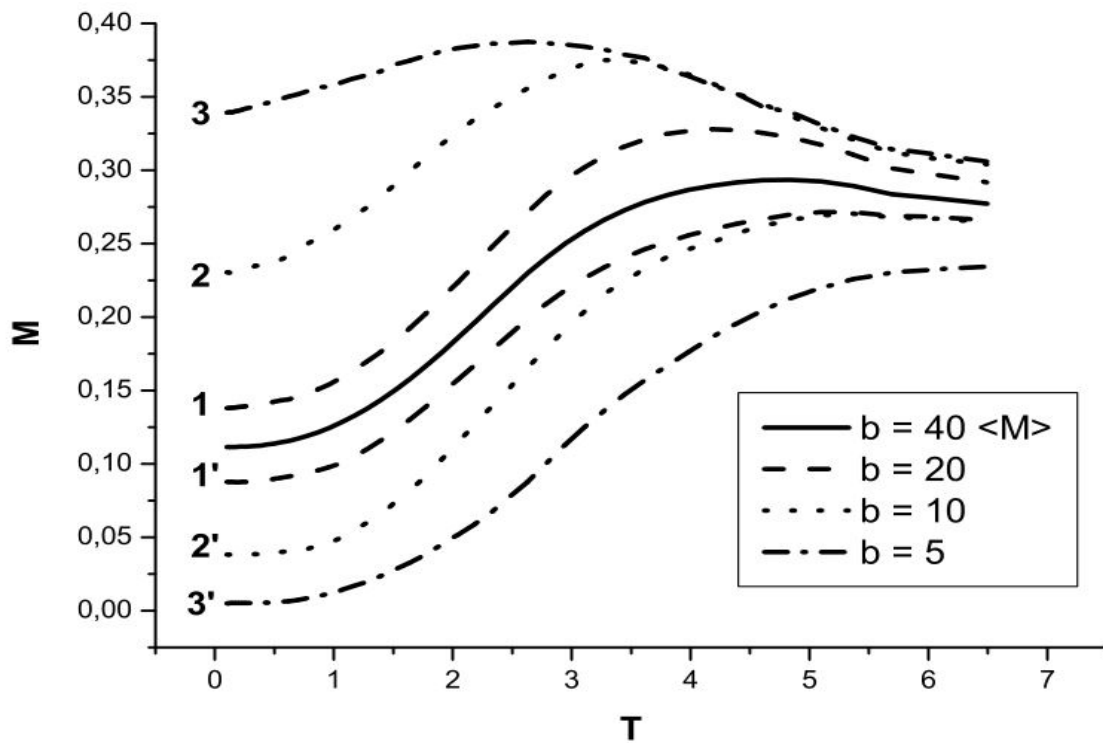


Рисунок 3.7 Температурная зависимость локальных значений полной намагниченности M для блоков с размерами $b = 5, 10, 20$.

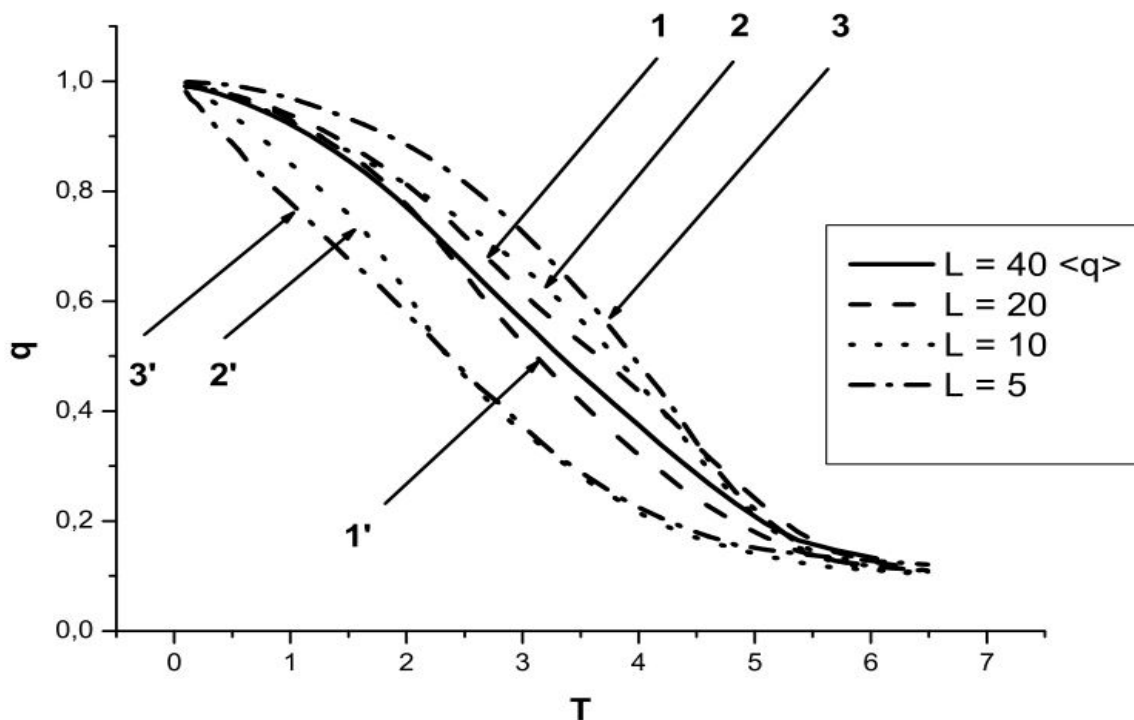


Рисунок 3.8 Температурная зависимость локальных значений спин-стекольного параметра порядка q для блоков с размерами $b = 5, 10, 20$

в низкотемпературной фазе отсутствует за исключением температурной области, близкой к критической температуре $T_c = 8.73$. Температурное поведение M_{stg} наглядно указывает на антиферромагнитное упорядочение в системе при данных условиях с антиферромагнитным основным состоянием.

Для подтверждения представлений о доменной структуре смешанного фазового состояния сильно неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями нами было осуществлено в рамках статистического метода параллельных температур исследование температурной зависимости локальных значений магнитных характеристик для кубических блоков с размерами $b = 5, 10, 20$, на которые разбивалась решетка с максимальным рассмотренным размером $L = 40$. На рисунках 3.6, 3.7 и 3.8 представлены данные зависимости, при этом «жирными» кривыми нанесены зависимости средних $M_{stg}(T)$, $M(T)$ и $q(T)$ для всей решетки с $L = 40$, а кривыми 1 и 1', 2 и 2', 3 и 3' — минимальные и максимальные значения данных величин для блоков с $b = 5, 10, 20$, соответственно. Анализ данных рисунков и полученных данных по всей совокупности блоков показывает, что с понижением температуры размеры типичных антиферромагнитных доменов уменьшаются от $l_\alpha \simeq 20$ до $l_\alpha \simeq 10$, а размеры

ферромагнитных доменов — от $l_f \simeq 10$ до $l_f \simeq 5$ с увеличением объема спин-стекольной фазы, пока при $T = 0$ не реализуется спин-стекольное основное состояние.

3.4. Выводы

Таким образом, в результате применения численного метода параллельных отжига для исследования низкотемпературного поведения трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели со случайными магнитными полями было наглядно показано, что для слабо неупорядоченных систем реализуется антиферромагнитное упорядоченное состояние, в то время как в области сильного структурного беспорядка эффекты случайных магнитных полей приводят к осуществлению нового фазового состояния системы. Оно характеризуется сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы, с реализацией спин-стекольного основного состояния.

Глава 4

Компьютерное моделирование критической динамики трехмерных неупорядоченных магнетиков

В данной главе осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной модели Изинга с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси. Рассмотрены системы с размерами 48^3 и 144^3 . Для определения динамического индекса z , характеризующего критическое замедление времени релаксации системы $t_c \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, применен метод Монте-Карло для односпиновой динамики совместно с методом динамической ренорм-группы [47], впервые обобщенный на случай моделирования неупорядоченных систем. Для этого осуществлялась процедура блочного разбиения системы, когда блок b^d соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым ориентацией направлением большинства спинов в блоке.

Все основные результаты, представленные в данной главе опубликованы в работах [103–107, 123, 148–152]. Результаты приведенные в данной в главе получены совместно с В.В.Прудниковым. Личный вклад автора заключается в получении большей части методических результатов, разработке программного, в проведении значительной части расчетов, анализе и интерпретации полученных данных, написании статей и является определяющим. Разработку процедуры блочного разбиения ренормгруппового преобразования для структурно неупорядоченных систем выполнена совместно с В.В. Прудниковым. Гипотеза ступенчатой универсальности критического поведения структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга была предложена совместно с В.В. Прудниковым. С.А. Золоторев принимал участия в обработке результатов моделирования.

4.1. Определение критического индекса z для одородной и неупорядоченной модели Изинга

Для определения динамического индекса z , характеризующего критическое замедление времени релаксации системы $t_c \sim |T - T_c|^{-z\nu}$, применен метод Монте-Карло для односпиновой динамики совместно с методом динамической ренорм-группы [47, 153], впервые обобщенным на случай моделирования неупо-

рядоченных систем в работах [123, 148]. Для этого осуществлялась процедура блочного разбиения системы, когда блок b^d соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым ориентацией направлением большинства спинов в блоке.

Переопределенная система спинов образует новую решетку с намагниченностью m_b . Если намагниченность исходной решетки в процессе релаксации достигает некоторого значения m_1 за время t_1 , а переопределенная система достигает того же значения m_1 за время t_b , то использование двух систем после блочного разбиения с размерами блоков b и b' и определение промежутков времени t_b и $t_{b'}$, но истечения которых их намагниченности m_b и $m_{b'}$ достигнут одного и того же значения m_1 , позволяет получить динамический индекс z из соотношения

$$\frac{t_b}{t_{b'}} = \left(\frac{b}{b'}\right)^z \quad \text{или} \quad z = \frac{\ln(t_b/t_{b'})}{\ln(b/b')} \quad (4.1)$$

в пределе достаточно больших b и $b' \rightarrow \infty$.

Этот алгоритм был применен к однородной и примесным системам с размерами 48^3 , $L = 144$. Размер системы позволял осуществить разбиение на блоки с размерами $b = 2, 3, 4, 6, 8, 12$ для $L=48$ и $b = 2, 3, 4, 6, 8, 9, 12, 16, 18, 24, 32, 48, 72$ для $L = 144$. Процедура блочного разбиения исходной спиновой и примесной конфигураций осуществлялась на основе критерия спиновой связности. Так, блок с размерами b^d считался спиновым и заменялся эффективным спином с направлением, определяемым направлением большинства спинов в блоке, если в нем существовал спиновый кластер, связывающий противоположные грани блока. В противном случае блок считался примесным и заменялся пустым узлом в перенормированной решетке. В ситуации, когда в блоке существовал спиновый кластер, но намагниченность блока была нулевой, блок заменялся эффективным спином с направлением, выбранным случайным образом. Для системы 48^3 осуществлялась процедура моделирования релаксации из 1000 шагов Монте-Карло на спин при 20 – 30 различных конфигурациях примесей. Для системы 144^3 осуществлялась процедура моделирования релаксации из 10000 шагов Монте-Карло на спин при 1000 различных конфигурациях примесей. По полученным результатам проводилось усреднение зависимостей $m_b(t)$. Примесный кластер выращивался по алгоритму Хаммерсли-Лиса-Александровица [90]. На рисунках 4.1 – 4.3 приведены построенные в двойном логарифмическом масштабе графики изменения исходной и перенормирован-

ных намагниченностей $m_b(t)$ от времени для однородной и примесных систем, усредненные по прогонам и примесным конфигурациям. Было выполнено моделирование систем с концентрациями спинов $p = 1.0; 0.95; 0.8; 0.6; 0.4$ для 48^3 и $p = 0.95; 0.8; 0.6; 0.5$ для 144^3 . Анализ кривых релаксации для $m_1(t)$, проведенный нами при критической температуре $T_c(p)$ ($T_c(p)$ для $L = 48$ взято из работы [154]: $T_c(1.0) \simeq 4.5108$, $T_c(0.95) \simeq 4.2571$, $T_c(0.8) \simeq 3.4959$, $T_c(0.6) \simeq 2.4178$, $T_c(0.4) \simeq 1.2066$ в единицах J/k). Для решетки с линейным размером $L = 144$ моделирование осуществлялось при критических температурах, определенных [102] ($T_c(0.95) \simeq 4.26267$, $T_c(0.8) \simeq 3.49948$, $T_c(0.6) \simeq 2.42413$, $T_c(0.5) \simeq 1.84509$

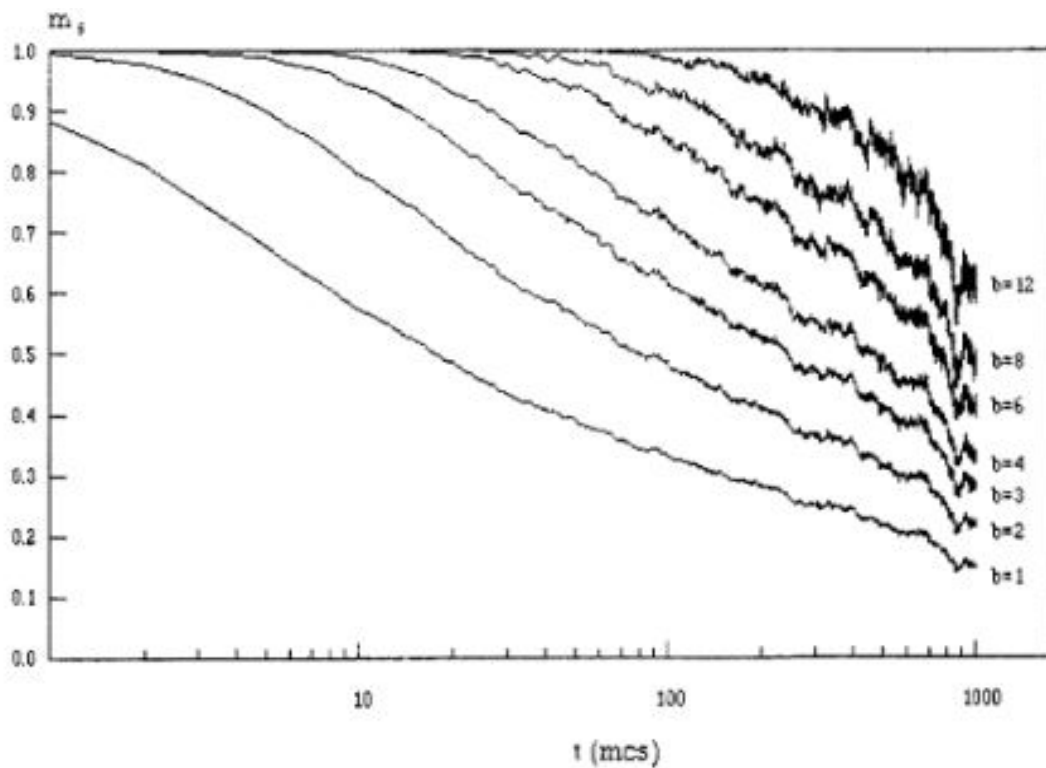


Рисунок 4.1 Изменение исходной m_1 и перенормированных m_b намагниченностей от времени (единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин) для однородной модели Изинга и линейным размером 48

Для независимого определения значений индекса z лучше использовать соотношение (4.1). Однако выявленный степенной характер релаксации намагниченности при критической температуре позволил в отличие от работ [47, 153] использовать другую процедуру обработки кривых для перенормированных намагниченностей $m_b(t)$. Так, кривые $m_b(t)$, построенные в двойном логарифмическом масштабе, аппроксимировались прямыми $\lg m_b = k_b \lg t + n_b$ по методу

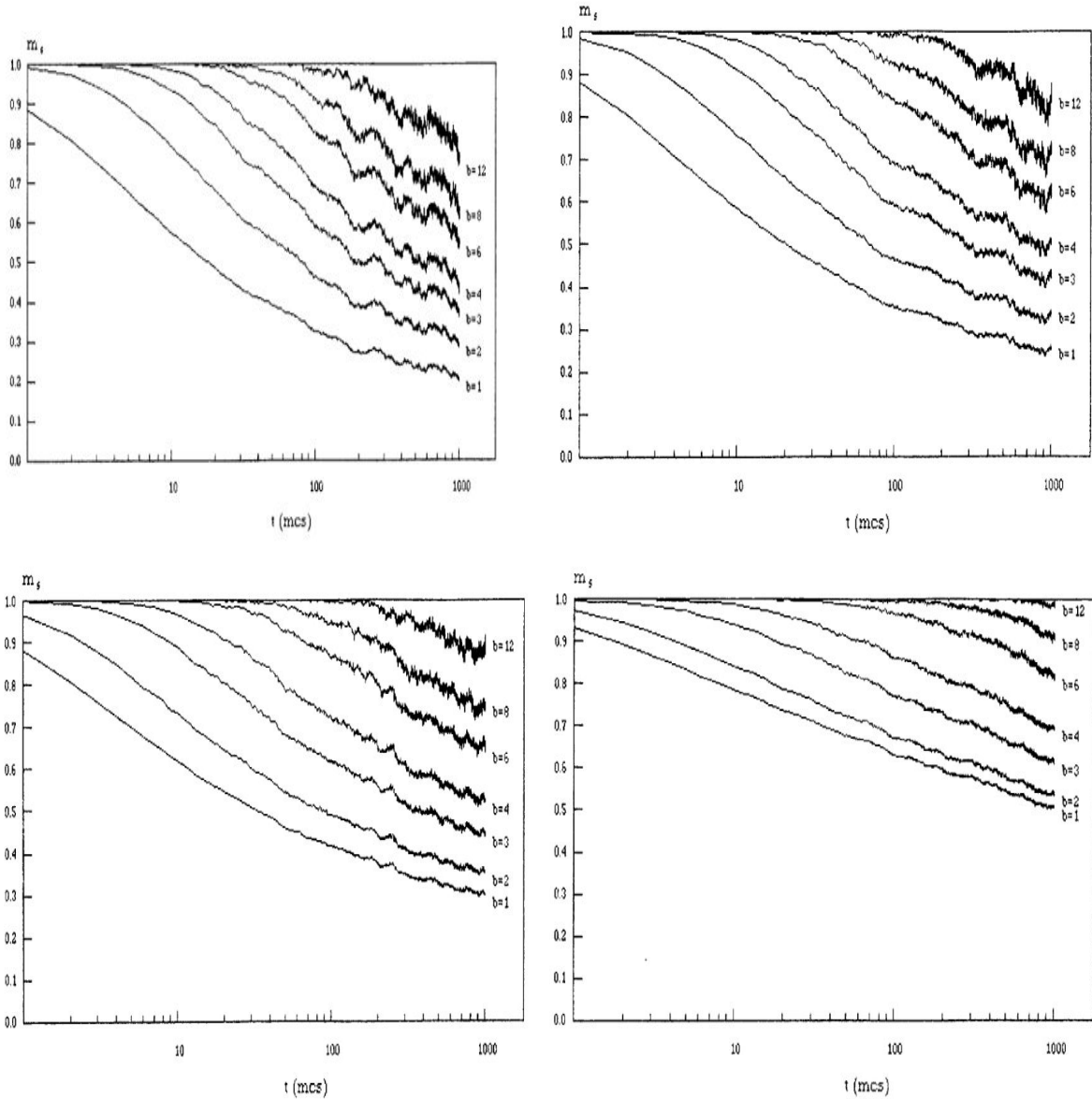


Рисунок 4.2 Изменение исходной m_1 и перенормированных m_b намагниченностей от времени (единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин) для разбавленной модели Изинга и линейным размером 48 со спиновой концентрацией $p = 0,95, 0,8, 0,6$ и $0,4$

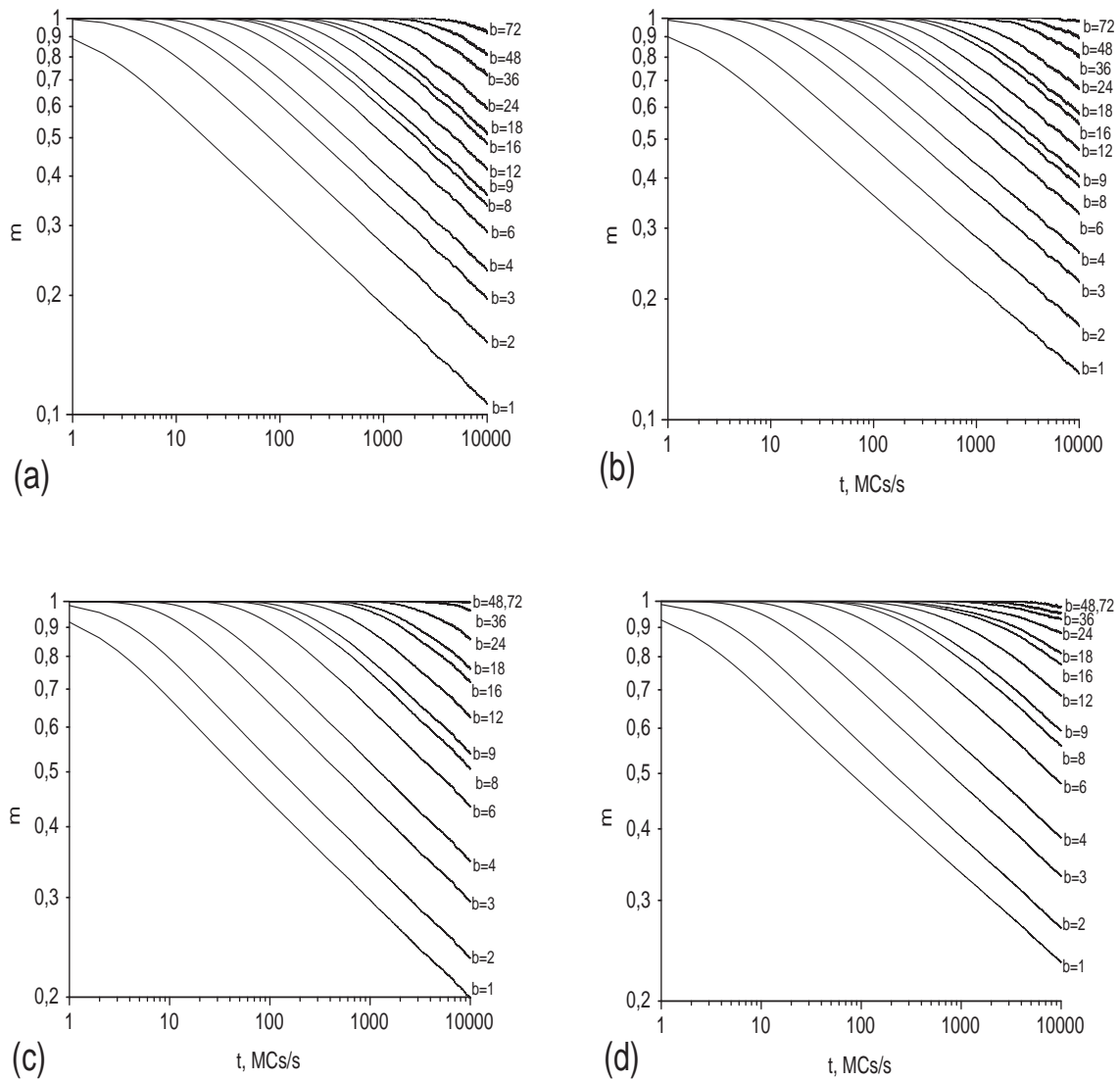


Рисунок 4.3 Изменение исходной m_1 и перенормированных m_b намагниченностей от времени (единица времени соответствует шагу Монте-Карло на спин) для разбавленной модели Изинга и линейным размером 144 со спиновой концентрацией $p = 0.95, 0.8, 0.6$ и 0.5

наименьших квадратов в интервалах изменения Δm_b , наиболее соответствующих степенному характеру их изменения. Затем осуществлялась процедура усреднения коэффициентов k_b с выделением среднего k_{av} и последующего определения параметров n_b прямых $\lg m_b = k_{av} \lg t + n_b$ путем их проведения через точки пересечения с прямыми $\lg m_b = k_b \lg t + n_b$ в середине интервалов Δm_b . В результате формула для определения z переходит в выражение

$$z = \frac{n_{b'} - n_b}{k_{av} \lg(b/b')}. \quad (4.2)$$

Таблица 4.1 Значение динамического критического индекса z для систем с различной спиновой концентрацией p при моделировании системы с $L = 48$

b/p	1.0	0.95	0.8	0.6	0.4
3	2.34 ± 0.07				
4	2.33 ± 0.06				
6	2.21 ± 0.03	2.33 ± 0.04	2.51 ± 0.08	2.45 ± 0.06	2.73 ± 0.06
8	2.12 ± 0.02	2.23 ± 0.02	2.44 ± 0.07	2.53 ± 0.05	2.83 ± 0.05
12	2.04 ± 0.02	2.27 ± 0.04	2.36 ± 0.07	2.51 ± 0.05	2.67 ± 0.04

На основе соотношения (4.2) были получены наборы значений индекса z_b , соответствующих различным b при $b' = 1$ (таблицы 4.1, 4.2). Процедура ренормгруппового преобразования для примесных систем выходит на обоснованную асимптотику поведения m_b как функции параметра блочного разбиения b при больших значениях b , чем для однородной системы, поэтому были выделены для анализа значения индекса z_b , соответствующие $b = 6, 8, 12$ для примесных и $b \geq 3$ для однородной систем. Выделенная тенденция зависимости z от b позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай $b \rightarrow \infty$,

Таблица 4.2 Значение динамического критического индекса z для систем с различной спиновой концентрацией p при моделировании системы с $L = 144$

b/p	0.5	0.6	0.8	0.95
8	2.638(50)	2.554(45)	2.283(35)	2.246(25)
9	2.659(50)	2.571(50)	2.285(35)	2.240(30)
12	2.689(60)	2.604(60)	2.287(40)	2.226(30)
16	2.699(60)	2.636(60)	2.288(40)	2.213(35)
18	2.690(65)	2.655(65)	2.290(45)	2.210(35)

предполагающую зависимость

$$z_b = z_{b=\infty} + \text{const } b^{-1}. \quad (4.3)$$

В результате при $L = 48$ были получены следующие значения: для однородной системы $z(1.0) = 1.97 \pm 0.08$, для примесных систем $z(0.95) = 2.91 \pm 0.07$, $z(0.8) = 2.20 \pm 0.08$, $z(0.6) = 2.58 \pm 0.09$, $z(0.4) = 2.65 \pm 0.12$. Соответственно для $L = 144$: $z(0.95) = 2.19 \pm 0.07$, $z(0.8) = 2.29 \pm 0.06$, $z(0.6) = 2.72 \pm 0.08$, and $z(0.5) = 2.75 \pm 0.08$. Отсюда видно, что значения динамического индекса для $p = 0.95$ и $p = 0.8$ практически совпадают, а для $p = 0.6$ и $p = 0.4$ сопоставимы в пределах погрешности их определения. С учетом индекса z для чистой системы полученные значения условно могут быть разделены на три группы, значительно отличающиеся по величине. Отметим, что найденное значение индекса z для чистой системы находится в хорошем соответствии со значением $z = 1.99 \pm 0.03$, определенным в работе [153] при моделировании методом Монте-Карло систем с размерами 128^3 , 256^3 , 512^3 .

4.2. Обсуждение результатов моделирования

Проведем сравнение результатов компьютерного моделирования с результатами применения методов теории критических явлений к однородным и примесным системам. В работах [155, 158–161] представлены результаты теоретико-полевого описания критической динамики однородных и слабонеупорядоченных спиновых систем непосредственно для трехмерного случая. В трехпетлевом приближении с применением техники суммирования Паде-Бореля были получены значения индекса $z(p) = 2, 165$, справедливые в области концентраций примеси, много меньших порога спиновой перколяции. Аналогичный расчет для однородной изинговской системы, проведенный в четырехпетлевом приближении, дал значение $z(1, 0) = 2, 017$. Сопоставление теоретических результатов с результатами моделирования показывает их хорошее согласие для однородной системы и примесной системы с $p = 0.95$ и $p = 0.8$. Для $p = 0.6$ и $p = 0.4$ результаты моделирования демонстрируют существенное увеличение динамического индекса z . Это можно объяснить тем, что для кубической решетки изинговских спинов при $p \leq p_c^{(imp)} \simeq 0.69$ примеси образуют связыва-

вающий кластер, который для $T \leq T_c$ сосуществует со спиновым связывающим кластером вплоть до порога спиновой перколяции $p_c = 1 - p_c^{(imp)}$, образуя фрактало подобную структуру с эффективной дальнедействующей пространственной корреляцией в распределении примесей.

В результате область $p_c \leq p \leq p_c^{(imp)}$ характеризуется новым типом критического поведения неупорядоченной модели Изинга, определяемым протяженными примесными структурами, с новыми критическими индексами [162–164]. При этом динамический индекс z для модели Изинга с протяженными примесными структурами принимает более высокие значения, чем в случае модели Изинга с δ -коррелированными примесями, зависящими от характера пространственного распределения дефектов и определяемых параметром корреляции a .

В соответствии с работами [73, 75, 162–165], посвященными исследованию влияния корреляции примесей и протяженных дефектов структуры на критические свойства неупорядоченных систем, есть основания полагать, что в области с $p_c < p < p_c^{(imp)}$ существование протяженной примесной структуры приводит к изменению критерия Харриса [14] влияния замороженных точечных примесей. Поэтому изменение знака индекса теплоемкости α (с положительного на отрицательный) при переходе от однородного к примесному критическому поведению в изинговских магнетиках не является ограничением для осуществления нового типа критического поведения, обусловленного эффектами влияния протяженной примесной структуры.

На основе вышесказанного нами предлагается гипотеза ступенчатой универсальности критических индексов для трехмерных разбавленных магнетиков (для двумерных таких эффектов не возникает, так как $p_c > 0.5$), согласно которой в области разбавления $p \geq p_c$ могут наблюдаться пять типов различного критического поведения: однородное; примесное I при $p_c^{(imp)} < p < 1$ с эффектами влияния точечных примесей; примесное II при $p_c < p < p_c^{(imp)}$ с эффектами влияния протяженной примесной структуры; перколяционное примесное при $p = p_c^{(imp)}$ и перколяционное спиновое при $p = p_c$. Проявление данных типов критического поведения в разбавленных магнетиках ожидается в температурной области $|T - T_c(p)| / T_c(p) \leq (\Delta J / J_0)^{1/\varphi}$, определяемой значением соответствующего индекса <кроссовера> φ и ΔJ - мерой случайности в обменном взаимодействии, для концентраций спинов, далеких от пороговых значений и в области $|T - T_c(p)| / T_c(p) \leq (|p - p_c| / p_c)^{1/\varphi}$ для $|p - p_c| / p_c \ll 1$.

Для изинговских магнетиков с $p_c^{(imp)} < p < 1$ $\varphi = \alpha_{pure} \simeq 0.11$, поэтому примесное поведение с соответствующими универсальными индексами должно наблюдаться в узкой температурной области вблизи $T_c(p)$ с <кроссоверными> эффектами перехода к индексам для однородных систем. При $p_c < p < p_c^{(imp)}$ <кроссоверные> эффекты могут наблюдаться вблизи перколяционных пороговых значений. Вдали от них явление <кроссовера> или не наблюдается, или может проявиться в виде перехода между индексами двух типов примесного поведения. В качестве своеобразного экспериментального подтверждения выдвигаемой гипотезы можно рассматривать результаты работы [76], в которой исследование разбавленных магнетиков $Fe_pZn_{1-p}F_2$ с $p = 0.6$ и 0.5 осуществлялось как раз в области $p_c < p < p_c^{(imp)}$ с $p_c = 0.25$. В работе были получены критические индексы, отличающиеся от индексов однородной системы, но, к удивлению авторов, не были обнаружены <кроссоверные> явления перехода к индексам однородного критического поведения.

4.3. Выводы

В заключении главы приведем ее основные результаты:

- Осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга;
 - Разработана процедура блочного разбиения спиновых структурно неупорядоченных систем и определения динамического критического индекса z ;
 - Впервые получены значения динамического критического индекса z в широкой области изменения концентрации спинов.
 - Для сильно структурно неупорядоченных спиновых систем результаты компьютерного моделирования демонстрируют существенное увеличение индекса z ;
 - Для объяснения результатов компьютерного моделирования критической динамики предложена гипотеза ступенчатой универсальности трехмерных структурно неупорядоченных изинговских систем. Согласно предлагаемой гипотезы в структурно неупорядоченной модели Изинга могут наблюдаться пять типов различного критического поведения:
1. критическое поведение чистой системы при $p = 1$;

2. критическое поведение слабо неупорядоченной системы при $p_c^{imp} < p < 1$ с эффектами влияния точечных дефектов;
3. критическое поведение сильно неупорядоченной системы при $p_c < p < p_c^{imp}$ с эффектами влияния протяженной примесной структуры;
4. перколяционное примесное при $p = p_c^{imp}$;
5. перколяционное спиновое при $p = p_c$.

Глава 5

Теоретико-полевое описание неравновесного критического поведения однородных и неупорядоченных магнитных систем

Как известно, фазовые переходы в однородных магнетиках изменяются с введением в систему случайно распределенных замороженных примесей лишь для изинговских магнетиков [14]. Метод ε -разложения позволяет рассчитывать значения критических индексов для разбавленных магнетиков [15]. Однако, асимптотическая сходимость рядов ε -разложения в этом случае еще более слабая, чем для однородных магнетиков [166]. Ренормгрупповой подход к описанию разбавленных магнетиков, проведенный в [167] непосредственно для трехмерных систем, позволил получить значения статистических критических индексов, согласующиеся с результатами эксперимента [76].

В данной главе проводится теоретико-полевое описание критической динамики неупорядоченной модели Изинга. Непосредственно для трехмерной системы вычисляется значение динамического критического индекса в двухпетлевом приближении с применением техники суммирования Паде-Бореля. Проводится сравнение с результатами применения ε -разложения и значениями динамического индекса для однородных систем, вычисленных в трехпетлевом приближении, а также полученных при численном моделировании методами Монте-Карло. Обсуждаются эффекты влияния примеси на критическое поведение двумерных систем. Сопоставляются процессы критического поглощения и дисперсии звука для однородных и примесных систем. Все основные результаты, представленные в данной главе опубликованы в работах [103–107, 151, 155–157]. Результаты приведенные в данной в главе получены совместно с В.В.Прудниковым. Личный вклад автора заключается в получении большей части методических результатов и в проведении значительной части расчетов, анализе и интерпретации полученных данных и написании статей.

5.1. Определение модели и методика описания динамики неупорядоченных систем.

Рассматриваемая модель представляет собой классическую спиновую систему с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси, опи-

сываемую гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j,$$

где, как обычно, \vec{S}_i — m -компонентная спиновая переменная; J_{ij} — константы обменного трансляционно инвариантного короткодействующего ферромагнитного взаимодействия; P_i — случайная переменная, описываемая функцией распределения

$$\mathbf{P}(P_i) = \mathbf{p} \delta(P_i - 1) + (1 - \mathbf{p}) \delta(P_i)$$

с $\mathbf{p} = 1 - c$, c — концентрация немагнитных атомов примеси. Данная модель термодинамически эквивалентна $O(m)$ -симметричной модели Гинзбурга-Ландау-Вильсона, определяемой эффективным гамильтонианом:

$$H[\varphi, V] = \int d^d x \left(\frac{1}{2} [|\nabla \vec{\varphi}|^2 + r_0 \vec{\varphi}^2 + V(x) \vec{\varphi}^2] + \frac{g_0}{4!} \vec{\varphi}^4 \right), \quad (5.1)$$

где $\vec{\varphi}(x, t)$ — m -компонентный параметр порядка; $V(x)$ — потенциал случайного поля примесей; $r_0 \sim T - T_{oc}(p)$; T_{oc} — критическая температура разбавленного магнетика, определяемая теорией среднего поля; g_0 — положительная константа; d — размерность системы. Потенциал примесей зададим гауссовским распределением

$$\mathbf{P}_v = \mathbf{A}_v \exp \left(-(8\delta_0)^{-1} \int d^d x V^2(x) \right),$$

где \mathbf{A}_v — нормировочная константа, δ_0 — положительная константа пропорциональная концентрации примесей и квадрату величины их потенциала. Следует заметить, что отклонения распределения примесей от гауссовского несущественны вблизи критической температуры [72].

Динамическое поведение магнетика в релаксационном режиме вблизи критической температуры может быть описано кинетическим уравнением для параметра порядка типа уравнения Ланжевена:

$$\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} = -\lambda_0 \frac{\delta H}{\delta \vec{\varphi}} + \vec{\eta} + \lambda_0 \vec{h}, \quad (5.2)$$

где λ_0 — кинетический коэффициент; $\vec{\eta}(x, t)$ — гауссова случайная сила, ха-

рактически характеризующая влияние теплового резервуара и задаваемая функцией распределения:

$$\mathbf{P}_\eta = \mathbf{A}_n \exp \left(-(4\lambda_0)^{-1} \int d^d x dt \vec{\eta}^2(x, t) \right)$$

нормировочной константой \mathbf{A}_n ; $\vec{h}(t)$ — внешнее поле, термодинамически сопряженное параметру порядка. Временная корреляционная функция $\mathbf{G}(x, t)$ параметра порядка определяется путем решения уравнения (5.2) с $\vec{H}[\varphi, V]$, задаваемым (5.1), относительно $\vec{\varphi}[\vec{\eta}, \vec{h}, v]$ с последующим усреднением по гауссовской случайной силе $\vec{\eta}$ с помощью \mathbf{P}_η , по случайному потенциалу поля примесей $V(x)$ с помощью \mathbf{P}_v и выделением линейной $\vec{h}(0)$ части решения, т. е.:

$$\mathbf{G}(x, t) = \frac{\delta}{\delta \vec{h}(0)} [\langle \varphi(x, t) \rangle]_{\text{imp}} \Big|_{\vec{h}=0}$$

с

$$[\langle \varphi(x, t) \rangle]_{\text{imp}} = B^{-1} \int D\{\vec{\eta}\} D(V) \vec{\varphi}(x, t) \mathbf{P}_\eta \mathbf{P}_v,$$

$$B = \int D\{\vec{\eta}\} D\{V\} \mathbf{P}_\eta \mathbf{P}_v$$

При применении стандартной ренормгрупповой техники к данной динамической модели приходится сталкиваться со значительными трудностями. Однако, для однородных систем в отсутствие беспорядка, вносимым присутствием примесей, было показано [168], что критическая динамическая модель, основанная на уравнении типа Ланжевена, полностью эквивалентна стандартной лагранжевой системе [61] с лагранжианом

$$L = \int d^d x dt \left(\lambda_0^{-1} \vec{\varphi}^2 + i\vec{\varphi}^* \left(\lambda_0^{-1} \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + \frac{\delta H}{\delta \vec{\varphi}} \right) \right).$$

При этом корреляционная функция $\mathbf{G}(x, t)$ параметра порядка для однородной системы определяется как

$$\mathbf{G}(x, t) = \langle \vec{\varphi}(0, 0) \vec{\varphi}(x, t) \rangle = \Omega^{-1} \int D\{\vec{\varphi}\} D\{\vec{\varphi}^*\} \vec{\varphi}(0, 0) \vec{\varphi}(x, t) \exp(-L[\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*])$$

с

$$\Omega = \int D(\vec{\varphi}) D(\vec{\varphi}^*) \exp(-L[\vec{\varphi}, \vec{\varphi}^*]).$$

Обобщение данного теоретико-группового подхода и детали его приме-

нения к критической динамике разбавленных магнетиков с замороженными точечными примесями и протяженными дефектами в рамках ε -разложения изложены в работе [165].

5.2. Получение ренорм-групповых уравнений и определение скейлинговых функций.

Фейнмановские диаграммы, определяющие вклады в корреляционную функцию параметра порядка и 4-хвостные вершины содержат d -мерное интегрирование по импульсам и характеризуются вблизи критической точки ультрафиолетовой расходимостью в области больших импульсов q типа полюсов. Для устранения этих полюсов применяется схема размерной регуляризации, связанной с введением перенормированных величин [169]. Определим перенормированный параметр порядка как $\varphi = Z^{-1/2}\varphi_0$. Тогда перенормированные вершинные функции будут иметь обобщенный вид:

$$\Gamma^{(n)}(q, \omega; r, g, \delta, \lambda, \mu) = Z^{n/2}\Gamma_0^{(n)}(q, \omega; r_0, g_0, \delta_0, \lambda_0) \quad (5.3)$$

с перенормированными константами связи g , δ , температурой r и кинетическим коэффициентом λ

$$\begin{aligned} g_0 &= \mu^{4-d}Z_g g, & \delta_0 &= \mu^{4-d}Z_\delta \delta, \\ r_0 &= \mu^2 Z_r, & \lambda_0^{-1} &= \mu^2 Z_\lambda \lambda^{-1}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

где масштабный параметр μ вводится для обезразмеривания величин. В (5.3) $\Gamma^{(2)}$ соответствует обратной корреляционной функции параметра порядка $\mathbf{G}(q, \omega)$, а $\Gamma^{(4)}$ — 4-хвостным вершинным функциям $\Gamma_g^{(4)}$ и $\Gamma_\delta^{(4)}$ для констант связи g и δ соответственно. Z -факторы определяются каждым последовательном порядке диаграммного разложения вершинных функций по g и δ из требования, чтобы перенормированные вершинные функции являлись регулярными. Данная схема регуляризации вершинных функций для разбавленных магнетиков была осуществлена нами в рамках двухпетлевого приближения (см. рисунок 5.1). Последующим шагом в теоретико-полевого подходе является определение скейлинговых функций $\beta_1(g, \delta)$, $\beta_2(g, \delta)$, $\gamma_r(g, \delta)$, $\gamma_\varphi(g, \delta)$, $\gamma_\lambda(g, \delta)$, задающих

дифференциальное уравнение ренормгруппы для вершинных функций:

$$\left[\mu \frac{\partial}{\partial \mu} + \beta_1 \frac{\partial}{\partial g} + \beta_2 \frac{\partial}{\partial \delta} - \gamma_r r \frac{\partial}{\partial r} + g_\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} - \gamma_\varphi \frac{n}{2} \mu \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \right] \times \\ \times \Gamma^{(n)}(q, \omega; r, g, \delta, \lambda, \mu) = 0$$

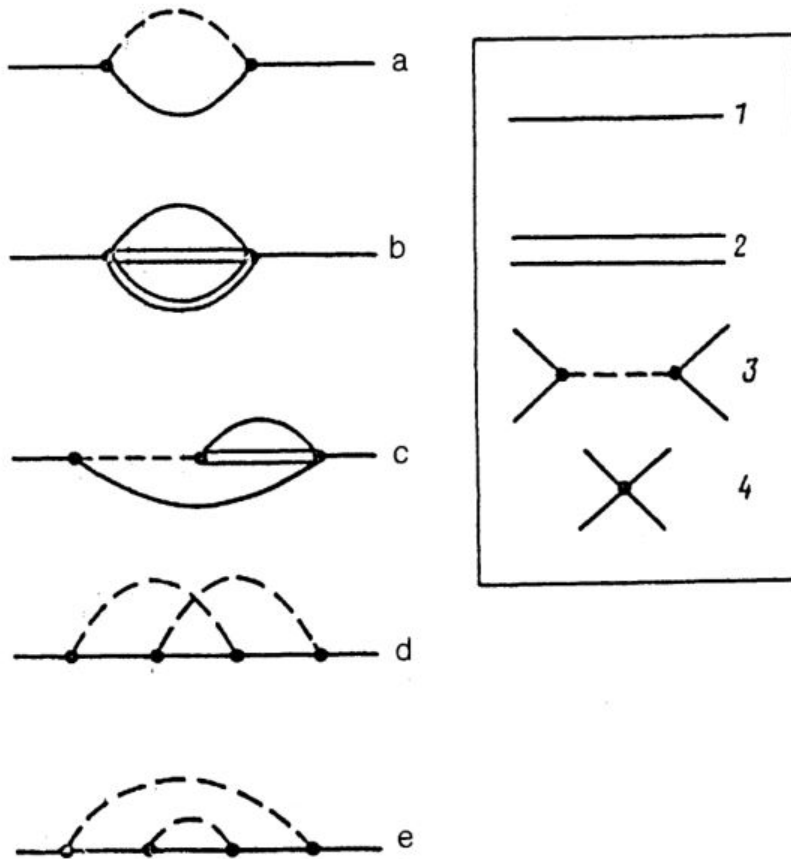


Рисунок 5.1 Диаграммное представление вкладов в вершинную функцию $I^{(z)}(q, \omega) = G^{-1}(q, \omega)$ в двухпетлевом приближении соответствующими весовыми множителями. Линии **1** соответствует $G_0(q, \omega) = (-l\omega/\lambda + q^2)^{-1}$, **2** — $G_0(q, \omega) = 2\lambda^{-1}(\omega^2/\lambda^2 + q^4)^{-1}$, **3** — $-2\delta \delta(\omega)$, **4** — g .

Для дальнейшего обсуждения динамической модели потребуется явный вид только функций β_1 , β_2 и динамической скейлинговой функции γ_λ , полученных в двухпетлевом приближении. Так, используя обозначения $v_1 = (m + 8) J_1 g / 6$

и $v_2 = 16J_1\delta$, имеем:

$$\begin{aligned}
\beta_1(v_1, v_2) &= -v_1 \left(1 - v_1 + \frac{3}{2}v_2 - v_1^2 \left[\frac{8(5m+22)}{(m+8)^2} f(d) - \frac{8(m+2)}{(m+8)^2} \right] - \right. \\
&- v_1 v_2 \left[\frac{12(m+5)}{(m+8)} f(d) - \frac{2(m+2)}{(m+8)} h(d) \right] + v_2^2 \left[\frac{21}{4} f(d) - \frac{1}{4} h(d) \right] \left. \right) + \mathbf{O}(v^4) \\
\beta_1(v_1, v_2) &= v_2 \left(1 + v_2 - \frac{2(m+2)}{(m+8)} v_1 + v_2^2 \left[\frac{11}{4} f(d) - \frac{1}{4} h(d) \right] + \right. \\
&\quad v_1^2 \left[\frac{24(m+2)}{(m+8)^2} f(d) - \frac{8(m+2)}{(m+8)^2} h(d) \right] - \\
&\quad \left. - v_1 v_2 \left[\frac{12(m+2)}{(m+8)} f(d) - \frac{2(m+2)}{(m+8)} h(d) \right] \right) + \mathbf{O}(v) \\
\gamma_\lambda(v_1, v_2) &= (4-d) \left(\frac{v_2}{4} + \frac{v_2^2}{8} [3f(d) - h(d) + \varphi(d)] - v_1 v_2 \frac{(m+2)}{(m+8)} [f(d) - h(d)] \right) + \\
&\quad + v_1^2 \frac{4(m+2)}{(m+8)^2} [\psi(d) - h(d)] + \mathbf{O}(v^3);
\end{aligned} \tag{5.5}$$

где $h(d) = D_1^3/J_1^2$, $f(d) = D_2/J_1^2 - 1/2$, $\psi(d) = D_3/J_1^2$, $\varphi(d) = D_4/J_1^2$ являются комбинациями однопетлевого интеграла

$$J_1 = \int d^d q / (q^2 + 1)^2 = \frac{Sd}{2} \Gamma(d/2) \Gamma(2 - d/2),$$

с $Sd = 2\pi^{d/2}/(2\pi)^d \Gamma(d/2)$, $\Gamma(x)$ — гамма-функцией и двухпетлевых интегралов:

$$\begin{aligned}
D'_1 &= \frac{\partial}{\partial k^2} \int d^d q_1 d^d q_2 / \left\{ (q_1^2 + 1) (q_2^2 + 1) \left[q_1 + q_2 + k \right]^2 + 1 \right\} \Big|_{k=0}, \\
D_2 &= \int d^d q_1 d^d q_2 / \left\{ (q_1^2 + 1) (q_2^2 + 1) \left[(q_1 + q_2)^2 + 1 \right] \right\}, \\
D_3 &= 3 \int d^d q_1 q_1 / \left\{ (q_1^2 + 1) (q_2^2 + 1) \left[q_1^2 + q_2^2 + \left(q_1^2 + q_2^2 + (q_1 + q_2)^2 + 1 \right) \right]^2 \right\}, \\
D_4 &= 2 \int d^d q_1 d^d q_2 / \left\{ (q_1^2 + 1) (q_2^2 + 1)^3 \right\} = J_1^2 (2 - d/2) / (1 - d/2).
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Выражения для функций $\beta_1(v_1, v_2)$ и $\beta_2(v_1, v_2)$ совпадают с соответствующими функциями, полученными в [167] при описании равновесного критического поведения разбавленных магнетиков. Численный расчет интегралов дал следующие значения величин $h(d=3) = 0.07408$, $f(d=3) = 0.16665$, $\psi(d=3) =$

0.40619, $\varphi(d=3) = -1$.

Природа критической точки для каждого значения m и d полностью задается стабильной фиксированной точкой для констант связи (v_1^*, v_2^*) , определяемой из требования обращения в нуль функций $\beta_1(v_1, v_2)$ и $\beta_2(v_1, v_2)$, т. е. $\beta_1(v_1^*, v_2^*) = 0$, $\beta_2(v_1^*, v_2^*) = 0$. Из приведенных выражений для данных функций видно, что v_1^* и v_2^* величины порядка $4 - d$, поэтому ряды разложения по v_1, v_2 для функций $\beta_1, \beta_2, \gamma_\lambda$ при $d = 3$ являются асимптотически сходящимися. Для их суммирования используется метод Паде-Бореля [62], который и был применен нами к функциям $\beta_1, \beta_2, \gamma_\lambda$. Численный анализ уравнений для определения фиксированных точек и условий их стабильности показывает, что в отличие от ε -разложения в данном случае не возникает случайного вырождения фиксированных точек при $m = 1$ [15], из четырех фиксированных точек интерес представляют только две: фиксированная точка для однородных систем ($v_1^* \neq 0, v_2^* = 0$) и примесная фиксированная точка ($v_1^* \neq 0, v_2^* \neq 0$), задающая новые критические свойства разбавленных магнетиков. Примесная фиксированная точка стабильна для $m < m_c$. Оценка m_c дает ее значение $m_c = 2.0114$ для $d = 3$ [167]. Однородная фиксированная точка не является стабильной при $m < m_c$. Ситуация становится обратной для $m > m_c$. Расчет индекса теплоемкости α_{xy} для трехмерной однородной XY-модели ($m = 2$) [171], являющийся наиболее точным до настоящего времени, показал, что $\alpha_{xy} < 0$ и в соответствии с критерием Харриса [14] присутствие примесей не приводит к новому критическому поведению. Что касается значения $m_c = 2.0114$, то можно надеяться, что учет более высоких порядков разложения по v_1, v_2 для функций β_1, β_2 приведет к понижению m_c и сделает его меньше двух. Таким образом, единственной системой, в которой примеси обуславливают новое критическое поведение, является изинговски подобная с $m = 1$. Примесная фиксированная точка для трехмерной модели Изинга задается значениями $v_1^* = 2.39631$, $v_2^* = 0.60509$, а однородная $v_1^* = 1.59661$, $v_2^* = 0$.

5.3. Расчет индекса z и анализ результатов

Подстановка значений констант связи в фиксированной точке в скейлинговую функцию $\gamma_\lambda(v_1, v_2)$ позволяет определить динамический критический индекс z : $z = 2 + \gamma_\lambda(v_1^*, v_2^*)$. Применение метода суммирования Паде-Бореля к

асимптотическому ряду разложения γ_λ по степеням v_1 и v_2 позволяет получить индекс z в виде:

$$z = 2 - \frac{\alpha_1}{\beta} - \frac{1}{\beta} \left(\alpha_2 + \frac{\alpha_1}{\beta} \right) (1 - 2F_0(1, 1; \beta)), \quad (5.7)$$

где $\alpha_1 = 2(4-d)(m+2)[\psi(d) - h(d)](v_1^*)^2/(m+8)^2$,

$$\alpha_2 = (4-d)v_2^*/4,$$

$$\beta = [3f(d) - h(d) + \varphi(d)]v_2^*/4 - 4(m+2)[f(d) - h(d)]v_1^*/(m+8),$$

$2F_0(1, 1, ; \beta)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Использование значения констант связи в примесной фиксированной точке для трехмерной модели Изинга дает следующие значения индекса z : $z_{\text{imp}}^{(2)}(d=3) = 2.237$, в то время как значение z_{imp} , полученное в том же двухпетлевом приближении на основе ε -разложения, равно $z_{\text{imp}}^{(2)} = 2.336$.

Вычисление индекса z для однородной модели Изинга в двухпетлевом приближении не требует применения техники суммирования для γ_λ , т. к. γ_λ в этом случае содержит только одно слагаемое, пропорциональное v_1^2 . В результате $z_{\text{pure}}^{(2)}(d=3) = 2.125$, в то время как вычисленное на основе ε -разложения $z_{\text{pure}}^{(2)} = 2.011$. Для уточнения влияния метода суммирования асимптотических рядов Паде-Бореля был проведен расчет функции γ_λ для однородных магнетиков в трехпетлевом приближении:

$$\gamma_\lambda = 4(4-d) \frac{(m+2)}{(m+8)^2} [\psi(d) - h(d)] v_1^2 \left(1 - \frac{3}{2} v_1 \left[\frac{c(d) - b(d)}{\psi(d) - h(d)} - \frac{4}{3} \right] \right), \quad (5.8)$$

где $b(d) = D'_5/J_1^3$, $c(d) = D_\sigma/J_1^3$, D'_5 и D_σ — трехпетлевые интегралы:

$$D'_5 = -\frac{\partial}{\partial k^2} \int d^d q_1 d^d q_2 d^d q_3 / \left\{ \left[(q_1 + k)^2 + 1 \right] (q_2^2 + 1) (q_3^2 + 1) \times \right. \\ \left. \times \left[(q_1 + q_2)^2 + 1 \right] \left[(q_1 + q_3)^2 + 1 \right] \right\} \Big|_{k=0}$$

$$D_\sigma = 8 \int d^d q_1 d^d q_2 d^d q_3 / \left\{ (q_1^2 + 1) (q_2^2 + 1) (q_3^2 + 1) \left[q_1^2 + q_2^2 + (q_1 + q_2)^2 + 1 \right] \times \right. \\ \left. \times \left[q_1^2 + q_3^2 + (q_1 + q_3)^2 + 1 \right]^2 \right\}.$$

Численные расчеты интегралов дают значение $b(d=3) = 0.09466$, $c(d=3) =$

2.12991. Применение метода Паде-Бореля приводит к следующему выражению для γ_λ :

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda = & 8(m+2)(4-d)[\psi(d) - h(d)] \times \\ & \times [-1 + \alpha(d)v_1/2 + 2F_0(1, 1; -\alpha(d)v_1/2)] / [\alpha(d)(m+8)]^2 \end{aligned} \quad (5.9)$$

с $\alpha(d) = \{[c(d) - b(d)] / [\psi(d) - h(d)]\} - 4/3$.

В результате для модели Изинга $z_{\text{pure}}^{(3)} = 2.014$, в то время как вычисленное в трехпетлевом приближении ε -разложения $z_{\text{pure}}^{(3)} = 2.025$.

Проведем сравнение полученных результатов с результатами других работ. Теоретическое исследование динамики разбавленных магнетиков в [165, 170, 171] проводилось с использованием ε -разложения. Эти результаты автоматически воспроизведены нами при $d = 4 - \varepsilon$. Что касается значений z_{pure} для однородных магнетиков, то в литературе имеется достаточно данных для сравнения. Численное моделирование методами Монте-Карло: $z_{\text{pure}} = 2.11 \pm 0.03$ [47], 1.99 ± 0.03 [153]; теоретико-полевой подход в двухпетлевом приближении при интерполяции результатов $1 + \varepsilon$ и $4 - \varepsilon$ разложений: 2.02 [172]. Отсюда видно, что полученное нами значение динамического индекса $z_{\text{pure}}(d=3) = 2.014$ согласуется лишь с результатами работ [153, 172]. В [153] осуществлялось моделирование систем очень больших размеров 128^3 , 256^3 , 512^3 с осуществлением блочной процедуры. Есть основания считать результат работы [153] наилучшим среди цитируемых.

Особый интерес для исследователей представляют разбавленные низко-размерные магнетики, описываемые двумерной моделью Изинга. Из-за равенства нулю индекса теплоемкости однородной модели влияние беспорядка вносимого присутствием примеси, становится неопределенным. Численный анализ устойчивости фиксированных точек показывает [167], что критическая размерность параметра порядка для двумерных систем $m_c = 1.1937$ и, следовательно, новое критическое поведение, индуцированное примесями, возможно только в модели Изинга. Однако более детальное рассмотрение этого случая [173, 174] позволило прийти к выводу, что влияние примеси затрагивает только поведение теплоемкости $C(T) \sim \ln |\ln |T - T_c||$, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения. В результате критическая динамика разбавленных двумерных изинговски подобных магнетиков в релаксационном режиме не отличается от динамики од-

нородной модели. Можно воспользоваться выражением (5.8) для функции γ_λ в трехпетлевом приближении и при $v_1^* = 2.42438$, $\psi = 1.18991$, $h = 0.11464$, $b = 0.15740$, $c = 4.01356$, соответствующих $d = 2$, $m = 1$, определить динамический критический индекс. Так, $z_{\text{pure}}^{(3)}(d = 2) = 2.277$.

Проведем сравнение полученного результата с результатами других работ. Численное моделирование методами Монте-Карло:

$$z = 2.13 \pm 0.03 [175], \quad 2.22 \pm 0.13 [176], \quad \simeq 2.23 [177], \\ 2.10 \pm 0.10 [178], \quad 2.14 \pm 0.02 [47], \quad 2.27 \pm 0.05 [179];$$

высокотемпературное разложение

$$z = 2.126 [172];$$

ренормгрупповой подход в реальном пространстве с использованием процедуры децимации:

$$z = 2.22 [180].$$

Приведенная подборка результатов говорит о том, что полученный нами при теоретико-полевоом подходе динамический индекс z для двумерной модели Изинга хорошо согласуется с результатом работы [179].

Подводя итоги анализа критической динамики разбавленных магнетиков можно сказать, что наличие беспорядка, связанного с присутствием примесей, существенно меняет критическое поведение трехмерной модели Изинга, характеризующееся более высокими значениями динамического индекса z_{imp} по сравнению с индексом однородной модели. Это находит отражение в аномально больших временах релаксации намагниченности вблизи критической точки: $\tau_p \sim |T - T_0|^{z\nu}$ (ν — критический индекс корреляционной длины), что ведет к изменению кинетических свойств магнетиков.

В критическом поведении разбавленных магнетиков необходимо особенно отметить область высоких концентраций примеси, близких к порогу перколяции. В ряде работ [70, 180–182] были высказаны идеи нарушения скейлинга при перколяционной концентрации примеси; в частности, предполагается, что для такой концентрации динамический индекс имеет вид $z = A \log \xi + B$, где ξ — корреляционная длина, A, B — некоторые неуниверсальные коэффициенты. Подобная форма индекса z позволяет объяснить аномально большое его значение, измеренное в $Rb_2(\text{Mg}_{0.41}\text{Co}_{0.59})F_4$ при нейтронном рассеянии [183].

5.4. Проявление эффектов критической динамики неупорядоченных систем в эксперименте

Предсказание теории относительно влияния примесей на динамическое критическое поведение магнетиков (более высокое значение z_{imp} ($d = 3$) по сравнению с z_{pure} ($d = 3$)) может быть зафиксировано в ряде экспериментальных методов: по неупругому рассеянию нейтронов (ширина линии $\omega_\phi \sim |T - T_c^-|^{z\nu}$ при $q = 0$ и $\omega_\phi \sim q^z$ при $T = T_c$), в магнитных резонансных методах ЭПР и ЯМР линии резонанса $\Delta\omega \sim |T - T_c|^{(d-2+\eta-z)\nu}$, где η — индекс Фишера), измерению динамической восприимчивости на внешнее высокочастотное магнитное поле ($\chi^{(\omega)} \sim \omega^{-\gamma/z\nu}$ при $T = T_c$, где γ — индекс восприимчивости), другой динамической особенностью является аномальный рост коэффициента поглощения звука $\alpha(\omega, \tau)$ и глубокий минимум скорости звука $C(\omega, \tau)$. Их асимптотическое поведение от частоты ω и приведенной температуры $\tau = (T - T_c)/T_c$ определяется следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \alpha(\omega, \tau) &= \tau^{-(z\nu+\alpha)} \omega^2 g(\omega\tau^{-z\nu}/D_0), \\ C^2(\omega, \tau) - C^2(\omega, \tau) &= \tau^{-\alpha} f(\omega\tau^{-z\nu}/D_0), \end{aligned} \quad (5.10)$$

где скейлинговые функции $g(x)$, $f(x)$ в гидродинамической области с $x = \omega\tau^{-z\nu}/D_0 \ll 1$ ведут себя как $g(0) \simeq 1$, $f(x) \sim x^{4/z}$, в критической области $x \gg 1$ их поведение носит флуктуационный характер и определяется критическими значениями амплитуд нелинейного взаимодействия флуктуаций долгоживущих возбуждений. Теоретическое рассмотрение акустических особенностей поглощения и дисперсии звука в неоднородной модели Изинга [184], выполненное в рамках ε -разложения, указывает на возможность экспериментальной идентификации этих особенностей.

5.5. Выводы

В конце главы выделим ее основные результаты. 1. Осуществлено теоретико-полевое описание критической динамики магнитных однородных систем и слабонеоднородных систем с замороженными немагнитными примесями. Непосредственно для трехмерных систем (т.е. без использования традиционного ме-

года ε -разложения были получены выражения для динамических скейлинговых функций:

а) в трехпетлевом приближении для однородных систем; б) в двухпетлевом приближении для слабо неупорядоченных систем.

2. При применении метода суммирования Паде-Бореля к асимптотическому ряду разложения для динамических скейлинговых функций был проведен расчет динамического критического индекса z . Так, для однородной системы индекс $z_{\text{pure}} = 2,014$, для слабо неоднородной системы $z_{\text{imp}} = 2,237$.

3. Проведено сравнение полученных значений индекса z с результатом применения ε -разложения. Слабая асимптотическая сходимость рядов ε -разложения для примесных систем проявилась в заметном отличии значений динамических индексов, получаемых в рамках используемых подходов.

4. Проведен анализ влияния слабой неоднородности, создаваемой присутствием примеси, на динамическое критическое поведение двумерной модели Изинга. Показано, что критическая динамика двумерных слабо неоднородных систем в релаксационном режиме отличается от динамики однородных систем.

5. Осуществлен расчет динамического критического индекса z для двумерной модели Изинга в трехпетлевом приближении без использования метода ε -разложения. Получено значение $z = 2,277$.

Глава 6

Компьютерное моделирование неравновесного критического поведения неупорядоченных магнетиков методом коротковременной динамики

В главе проведено численное исследование влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности $m(t)$ ферромагнитной структурно неупорядоченной системы в критической точке. Известно, что аномальные особенности в явлениях критической динамики определяются прежде всего эффектами дальнедействующей корреляции долгоживущих флуктуаций ряда термодинамических переменных. Фундаментальный интерес, в связи с этим, представляет исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния, созданного, например, при температурах много больших критической и характеризуемого поэтому малой корреляционной длиной, в сильно коррелированное состояние при критической температуре.

Все основные результаты, представленные в данной главе опубликованы в работах [103–107, 185–194]. Результаты приведенные в данной в главе получены совместно с В.В.Прудниковым, П.В. Прудниковым, Е.А. Поспеловым Личный вклад автора заключается в получении большей части методических результатов, в проведении значительной части расчетов, анализе, интерпретации полученных данных, написании статей и является определяющим. А.С. Криницын принимал участия в обработке результатов моделирования критической релаксации параметра порядка из низкотемпературного начального состояния при концентрации спинов 0.8. А.А. Кролевец, В.Н. Бородихин, М.В. Рычков принимали участия в проведении тестовых расчетов при малых концентрациях примесей. А.Ю. Петеримов, А.В. Чабров принимали участия в обработке результатов моделирования неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга. Д.В. Талашок, А.О. Рашев принимали участия в обработке результатов моделирования динамики возмущения начального состояния трехмерной неупорядоченной модели Изинга.

6.1. Метод коротковременной динамики

В работе [85] на основе ренормгруппового анализа неравновесного критического поведения спиновой системы с начальным значением намагниченности m_0 было показано, что после микроскопически малого промежутка времени t_{mic} для k -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма:

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} m^{(k)}\left(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0\right), \quad (6.1)$$

где t — время, $\tau = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура, b — произвольный масштабный фактор, L — линейный размер решетки, β , ν , z — известные критические индексы, x_0 — новый независимый критический индекс, задающий масштабную размерность начального значения намагниченности m_0 . На ранней стадии эволюции системы корреляционная длина еще достаточна мала и конечность размера моделируемой системы оказывается не существенной. Полагая в (6.1) $b = t^{1/z}$, для первого момента намагниченности ($k = 1$) и малой величины $m_0 t^{1/z}$ получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} m(t, \tau, m_0) &\sim m_0 t^{\theta'} F\left(t^{1/\nu z} \tau, t^{x_0/z} m_0\right) = \\ &= m_0 t^{\theta'} \left(1 + at^{1/\nu z} \tau\right) + O\left(\tau^2, m_0^2\right), \end{aligned} \quad (6.2)$$

где $\theta' = (x_0 - \beta/\nu)/z$. Для $\tau \rightarrow 0$ и достаточно малых t получаем асимптотическое поведение $m(t) \sim t^{\theta'}$. Временной интервал увеличения намагниченности $t_{cr} \sim m_0^{-z/x_0}$ заметно растет с уменьшением m_0 . С течением времени коротковременная динамика увеличения параметра порядка сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону $m(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$ с показателем, определяемым отношением $\beta/z\nu$ со статическими критическими индексами β и ν и динамическим критическим индексом z (рисунок 3.4)

Для численного определения показателя θ' рассматривается модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с линейным размером $L = 128$ и наложенными граничными условиями. Микроскопический га-

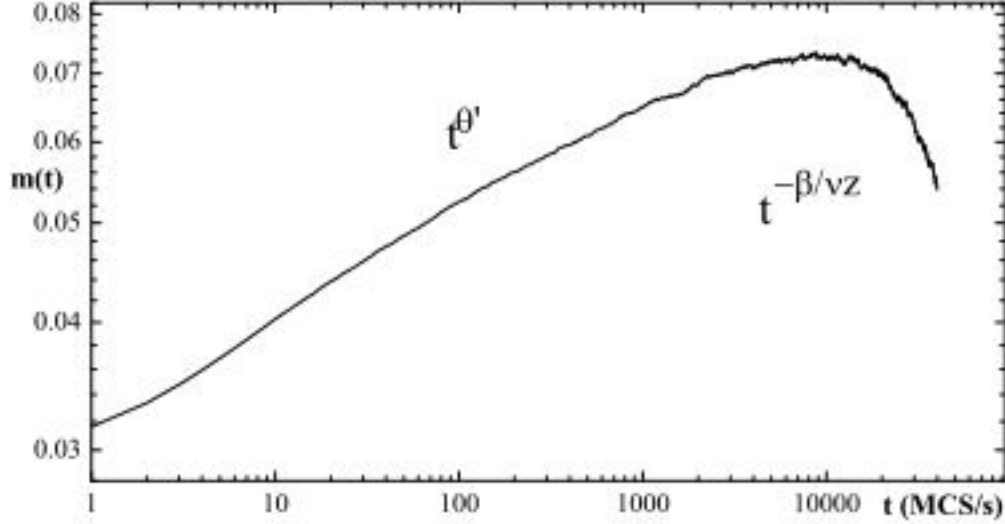


Рисунок 6.1 Эволюция намагниченности $m(t)$ из состояния с начальным значением намагниченности $m_0 = 0.03$ при температуре $T_c = 3.49948$, как результат компьютерного моделирования неравновесного поведения неупорядоченной модели Изинга с некоррелированными дефектами структуры при значении спиновой концентрации $p = 0.8$ и $L = 128$.

мильтониан неупорядоченной модели Изинга задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (6.3)$$

где $J > 0$ — интеграл обменного взаимодействия между закрепленными в узлах решетки спинами S_i , принимающими значения ± 1 . Немагнитные атомы примеси образуют пустые узлы. Числа заполнения p_i при этом принимают значения 0 или 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1 - p) \delta(p_i) + p \delta(1 - p_i), \quad (6.4)$$

с $p = 1 - c$, где c — концентрация атомов примеси.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применен алгоритм Метрополиса. Алгоритм Метрополиса, реализующий динамику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели A в классификации Гальперина-Хоэнберга [86] и позволяет провести сравнение получаемого в результате моделирования неравновесного критического поведения системы динамических критических индексов z и θ' с результатами

ренормгруппового описания.

6.2. Исследование влияния начального неравновесного состояния с $m_0 \ll 1$

При реализации алгоритма Метрополиса для неупорядоченной модели Изинга осуществляется численное определение временной зависимости k -го момента намагниченности $m^{(k)}(t)$ в виде

$$m^{(k)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i S_i(t) \right)^k \right\rangle \right], \quad (6.5)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям, а квадратные скобки — усреднение по различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации $p = 0.80$, $N_s = pL^3$ — число спинов в решетке. Усреднение вычисляемых величин проводилось по 4000 различным примесным конфигурациям с 25 прогонками для каждой примесной конфигурации. Для независимого вычисления динамических критических индексов θ' и z , а также отношения статических критических индексов β/ν в данной работе на каждом этапе эволюции системы наряду с намагниченностью системы определялась автокорреляционная функция

$$A(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right], \quad (6.6)$$

и второй момент намагниченности $m^{(2)}(t)$. Их скейлинговый анализ показывает [195], что при $m_0 = 0$ и критической температуре $T = T_c$ данные величины характеризуются степенной зависимостью от времени

$$A(t) \sim t^{-c_a}, \quad m^{(2)}(t) \sim t^{c_2}, \quad (6.7)$$

где $c_a = d/z - \theta'$, $c_2 = (d - 2\beta/\nu)/z$, d — размерность системы.

В данном параграфе осуществлялось моделирование при критической температуре $T_c = 3.49948(18)$, определенной в работе [102] при численных Монте-Карло исследованиях неупорядоченной трехмерной модели Изинга в равновес-

ном состоянии. Временное поведение намагниченности с начальными значениями $m_0 = 0.01, 0.02$ и 0.03 исследовалось на временах до 1000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s). Поскольку начальная спиновая конфигурация с намагниченностью m_0 должна быть неравновесной, для ее получения нами был применен следующий способ ее получения: с помощью алгоритма Вольфа при температуре $T = 8 \gg T_c = 3.49948$ система из начального состояния $\langle \text{все спины вверх} \rangle$ с $m = 1$ приводилась к состоянию с намагниченностью m , близкой к желаемой m_0 , а затем переворотом отдельных спинов достигалось состояние с m_0 . Полученная конфигурация сохранялась, а затем проводилось исследование ее временной эволюции при $T_c = 3.4998$ с помощью алгоритма Метрополиса.

На рисунке 6.2 представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные по 4000 различным примесным конфигурациям с 25 прогонками для каждой примесной конфигурации временные зависимости для намагниченностей системы. Они позволяют определять показатели $\theta'(m_0)$ и их асимптотическое значение $\theta'(m_0 \rightarrow 0)$ на основе линейной аппроксимации значений $\theta'(m_0)$ при $m_0 \rightarrow 0$. На рисунках 6.3 и 6.4 для данной системы, стартующей из неравновесного начального состояния с близким к нулю значением $m_0 = 0.0001$, представлены временные зависимости для второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ и автокорреляционной функции $A(t)$, также изображенные в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей c_a и c_2 в соответствии с (6.7).

Из рисунков видно, что на каждом графике могут быть выделены по два линейных участка: для временных интервалов в среднем от 7 до 50 MCS/s и от 150 до 1000 MCS/s. Это связано с наблюдаемым уже при моделировании структурно неупорядоченных систем с линейными дефектами [94] явлением кроссовера, т.е. перехода от критического поведения, характерного для однородных систем, к поведению, характеризуемого влиянием дефектов структуры. Были определены показатели для каждого линейного участка исследуемых величин. Полученные значения показателей приведены в таблице 6.1.

В данном параграфе был осуществлен учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем и неточности в определении их критической температуры, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов [94, 98, 124, 161]. Для этого были применены следующие

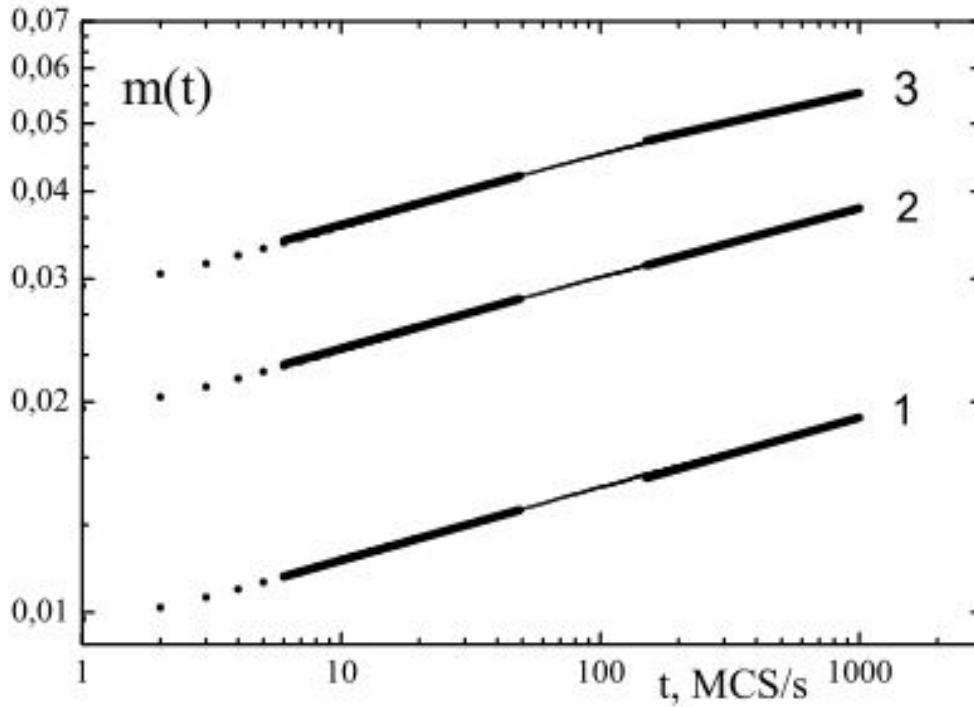


Рисунок 6.2 Временные зависимости критического поведения намагниченности $m(t)$ для систем со спиновой концентрацией $p = 0.80$ при начальных значениях $m_0 = 0.01$ (1); 0.02 (2); 0.03 (3), представленные в двойном логарифмическом масштабе.

выражения для временной зависимости наблюдаемых величин $X(t)$:

$$X(t) \sim t^\delta \left(1 + A_x t^{-\omega/z}\right), \quad (6.8)$$

где A_X — неуниверсальные амплитуды, ω является хорошо известным критическим индексом поправки к скейлингу, а показатель $\delta = \theta'$ в случае $X \equiv m(t)$, $\delta = -c_a$ в случае $X \equiv A(t)$ и $\delta = c_2$ в случае $X \equiv m^{(2)}(t)$. Теоретико-полевая оценка для ω в шестипетлевом приближении дает значение $\omega \simeq 0.25$ (10) [121].

Таблица 6.1 Критические показатели, характеризующие эволюцию неупорядоченной модели Изинга с $p = 0.80$ на разных временных интервалах

m_0	θ'	c_2	c_a	θ'	c_2	c_a
	$t \in [7, 50]$			$t \in [150, 100]$		
0.03	0.1016(9)			0.083(3)		
0.02	0.1031(10)			0.099(5)		
0.01	0.1043(12)			0.105(9)		
0	0.1057(17)	0.936(4)	1.347(8)	0.122(11)	0.859(5)	1.135(10)

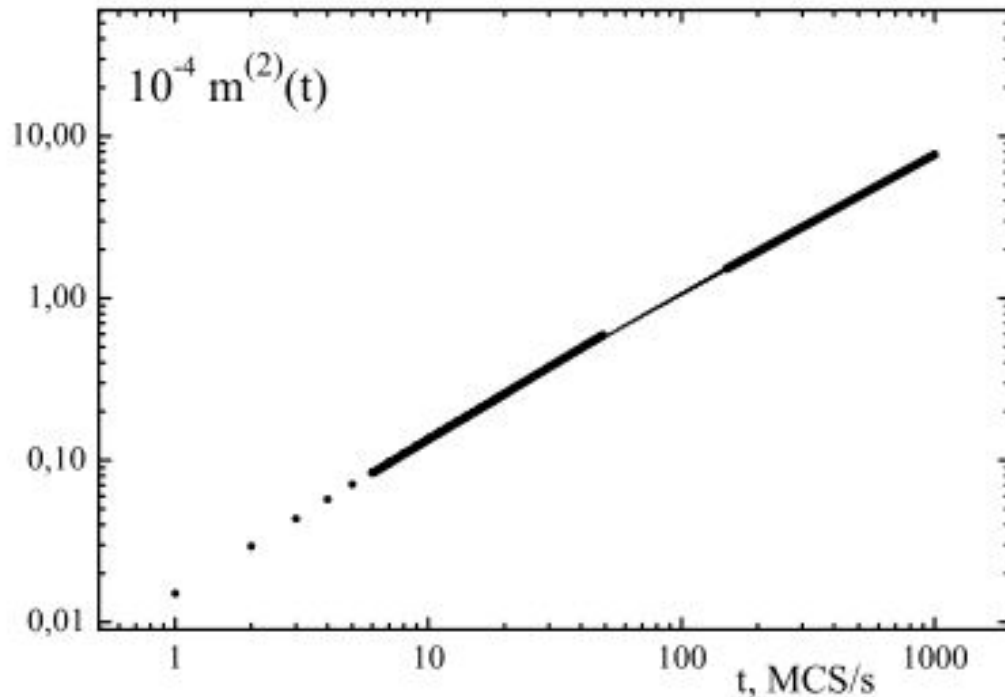


Рисунок 6.3 Временная зависимость критического поведения второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ для системы с $p = 0.80$, представленная в двойном логарифмическом масштабе.

Для расчета значений критических индексов θ' , c_a , c_2 и ω/z на временном интервале, соответствующем влиянию структурного беспорядка, был использован метод наименьших квадратов для наилучшей аппроксимации значений $m(t)$, $m(t)$ и $m^{(2)}(t)$ выражением (6.8). Процедура заключалась в следующем:

1. временной интервал проявления влияния дефектов структуры разбивался на всевозможные участки Δt , начиная от участков с $\Delta t = 50$ до участков с $\Delta t = 550$;
2. на каждом из участков Δt осуществлялось определение значения показателя δ при фиксированном значении ω/z ;
3. найденные значения δ усреднялись по выбранным участкам с определением среднего значения $\langle \delta \rangle$ и погрешности аппроксимации $\Delta \delta$;
4. показатель ω/z определялся из условия минимальности значений относительных погрешностей проведенных аппроксимаций.

Наряду с аппроксимационной погрешностью $\Delta \delta$ для показателей δ опре-

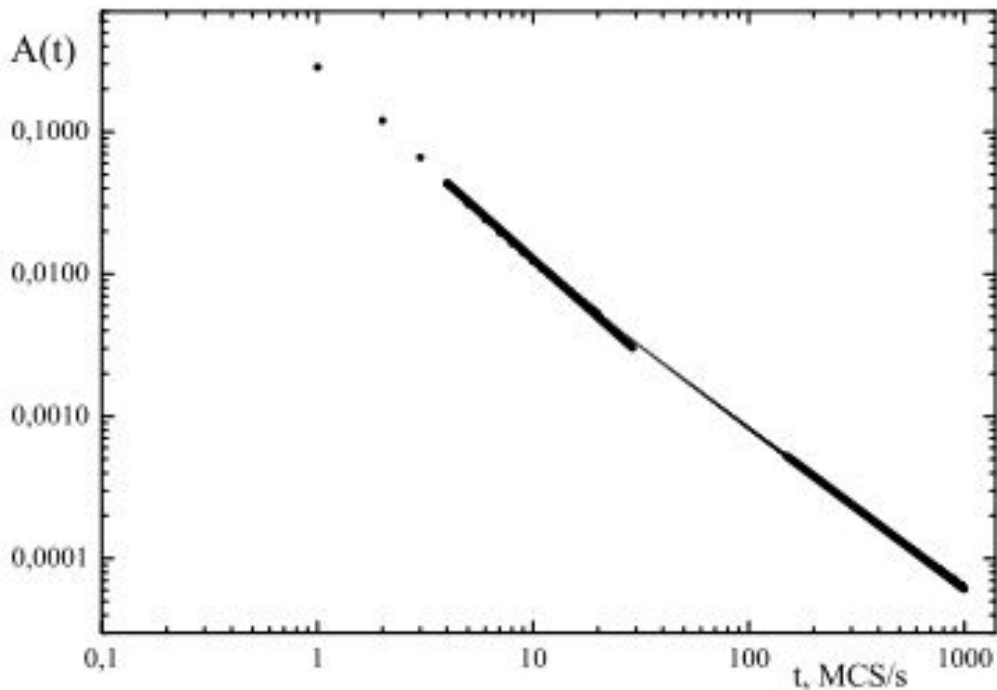


Рисунок 6.4 Временная зависимость критического поведения автокорреляционной функции $A(t)$ для системы с $p = 0.80$, представленная в двойном логарифмическом масштабе.

делялась их статистическая погрешность. Для этого общее количество используемых для усреднения примесных конфигураций делилось на 4 группы. Для каждой из групп вычислялись показатели θ' , c_a и c_2 , а затем определялись отклонения от показателей, найденных при использовании усредненных по общему количеству примесных конфигураций значений $m(t)$, $A(t)$ и $m^{(2)}(t)$.

В таблице 6.2 приведены полученные итоговые значения критических показателей и их погрешности. На основе данных значений показателей были определены динамические критические индексы $z = 2.191(42)$ и $\theta' = 0.127(16)$, отношение статических критических индексов $\beta/\nu = 0.504(24)$ и усредненное значение критического индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.256(56)$.

Сопоставление данных значений динамических критических индексов z и θ' с рассчитанными в рамках теоретико-полевого описания значениями [197] $z = 2.202(2)$ и $\theta' = 0.106(8)$, полученными в результате усреднения результатов применения различных методов суммирования, показывает их достаточно хорошее согласие. Заметно более лучшее согласие значений $z = 2.191(42)$ и $\theta' = 0.127(16)$ наблюдается с результатами применения к рядам теории метода суммирования Паде-Бореля-Лероя $z = 2.198$ и $\theta' = 0.120$.

Таблица 6.2 Критические показатели временной эволюции неупорядоченной модели Изинга с $p = 0.80$, вычисленные с учетом поправок к скейлингу

m_0	θ'	c_2	c_a
0.03	0.104(12), $\omega/z = 0.074$		
0.02	0.117(10), $\omega/z = 0.068$		
0.01	0.118(10), $\omega/z = 0.096$		
0	0.127(16), $\omega/z =$ 0.079(9)	0.909(4), $\omega/z =$ 0.112	1.242(10), $\omega/z =$ 0.160

Сопоставление рассчитанного значения $\theta' = 0.127(16)$ со значением $\theta' = 0.10(2)$ из работы [198], полученным для систем с различными спиновыми концентрациями, но одинаковыми начальными значениями намагниченности $m_0 = 0.01$, показывает их хорошее согласие в пределах статистических погрешностей измерения и погрешностей проведенных аппроксимаций, а также демонстрирует то, что полученное асимптотическое при $m_0 \rightarrow 0$ значение θ' оказывается выше, чем $\theta' (m_0 = 0.01)$ из [198]. Это объясняется выявленной тенденцией, что $\theta' (m_0^{(2)}) > \theta' (m_0^{(1)})$, если начальные намагниченности систем находятся в следующем соответствии друг с другом $m_0^{(2)} < m_0^{(1)}$. Таким образом, декларируемое в [198] хорошее согласие найденного показателя $\theta' = 0.10(2)$ со значением $\theta' = 0.0867$, полученным в [91] на основе применения метода ε -разложения в двухпетлевом ренормгрупповом описании, оказывается неубедительным, так как найденное значение $\theta' = 0.127(16)$ уже не согласуется с $\theta' = 0.0867$. Результаты проведенных нами исследований дают значительно больше оснований считать, что для слабо неупорядоченных изинговских систем реальным является значение показателя $\theta' = 0.127(16)$, которое оказывается выше значения $\theta' = 0.108(2)$ для однородных изинговских систем [195–197], а не ниже, как предсказывают результаты работ [91, 198].

Проведем теперь сопоставление полученных значений критических индексов $z = 2.191(42)$, $\beta/\nu = 0.504(24)$ и $\omega = 0.256(56)$ с результатами исследований, проведенных в других работах. Так, найденные значения индексов для систем с $p = 0.80$ находятся в достаточно хорошем соответствии с результатами работ по компьютерному моделированию, где для слабо неупорядоченных систем были получены значения $\nu = 0.684(5)$, $\beta = 0.355(3)$, $\beta/\nu = 0.519(8)$, $\omega = 0.370(63)$ [199], $\nu = 0.683(3)$, $\beta = 0.354(2)$, $\beta/\nu = 0.518(5)$ [98],

$z = 2.20(8)$; [123] , а также с результатами теоретико-полевого описания, где были вычислены следующие значения критических индексов: $\nu = 0.678(10)$, $\beta = 0.349(5)$, $\beta/\nu = 0.515(15)$, $\omega = 0.25(10)$, $z = 2.1792(13)$ [121, 161] и результатами экспериментальных исследований структурно неупорядоченных изинговских магнетиков, дающих $\nu = 0.69(1)$, $\beta = 0.350(9)$, $\beta/\nu = 0.507(20)$ (результаты представлены в обзоре [18]), $z = 2.18(10)$ [200].

Также, в данном параграфе проводилось численное исследование неравновесной критической эволюции из начального состояния с $m_0 \ll 1$ сильно неупорядоченной модели Изинга с концентрацией спинов $p = 0.6$. Временное поведение намагниченности с начальными значениями $m_0 = 0.005, 0.001, 0.0005$ и 0.0001 исследовалось на временах до 3000 MCS/s при критической температуре $T_c = 2.42413(9)$. Усреднение вычисляемых величин проводилось по 15000 различным примесным конфигурациям с 25 прогонками для каждой примесной конфигурации. Для независимого вычисления динамических критических индексов θ' и z , а также отношения статических критических индексов β/ν на каждом этапе эволюции системы наряду с намагниченностью системы $m(t)$ определялась автокорреляционная функция $A(t)$ и второй момент намагниченности $m^{(2)}(t)$.

Уменьшение моделируемых значений m 0 для сильно неупорядоченных систем обусловлено необходимостью скомпенсировать уменьшение интервала эволюции намагниченности $t_{cr} \sim m_0^{-z/x_0}$, вызванного изменившимся в большую сторону значением динамического индекса z для сильно неупорядоченных систем по сравнению со слабо неупорядоченными системами.

На рисунке 6.5 представлены в двойном логарифмическом масштабе зависимости для намагниченностей системы. Они позволяют определять показатели $\theta'(m_0)$ и их асимптотическое значение $\theta'(m_0 \rightarrow 0)$ на основе линейной аппроксимации значений $\theta'(m_0)$ при $m_0 \rightarrow 0$. На рисунках 6.6 и 6.7 для данной системы, стартующей из неравновесного начального состояния с близким к нулю значением $m_0 = 0.0001$, представлены временные зависимости для второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ и автокорреляционной функции $A(t)$, также изображенные в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей c_a и c_2 в соответствии с соотношениями (6.7).

При анализе временных зависимостей оказалось, что для сильно неупоря-

доченных систем в отличие от слабо неупорядоченных систем не наблюдается динамического режима с характеристиками однородной системы.

Система при своей эволюции из начального неравновесного состояния, созданного при $T \gg T_c$, к критическому состоянию при T_c проходит после T_{mic} последовательную серию промежуточных состояний в критической области, а именно от состояний, контролируемых неподвижной точкой для однородных систем в температурной области $|T - T_c(p)| / T_c(p) > [\Delta J(p) / J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, к состояниям, контролируемым неподвижной точкой для неупорядоченных систем, в температурной области $|T - T_c(p)| / T_c(p) > [\Delta J(p) / J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, где $\Delta J(p)$ — характеризует влияние дефектов структуры на величину случайности в обменном взаимодействии спиновых систем со спиновой концентрацией p , $J_0(p)$ — средняя величина обменного взаимодействия, α_0 — критический индекс для теплоемкости однородной системы, который для некоррелированных дефектов структуры совпадает с индексом кроссовера ϕ , определяющим влияние структурного беспорядка на критические свойства системы.

Величина $\Delta J(p) \sim c_{\text{imp}} = 1 - p$, где c_{imp} — концентрация дефектов. Поэтому для слабо неупорядоченных состояний температурная область вблизи критической температуры определяется как $|T - T_c(p)| / T_c(p) > [\Delta J(p) / J_0(p)]^{1/\alpha_0}$, где характеристики критического поведения неупорядоченных систем определяются критическими индексами однородной системы, является достаточно широкой, в то время как для сильно неупорядоченных систем — узкой. Поэтому в неравновесном критическом поведении слабо неупорядоченных систем наблюдаются переходные режимы от критического поведения однородных систем к режиму критического поведения структурно неупорядоченных систем, а для сильно неупорядоченных систем такие переходные режимы практически ненаблюдаемы.

Применение процедуры расчета поправок к скейлингу позволяет получить итоговые значения критические индексы $z = 2.589(52)$, $\theta' = 0.167(18)$, $\beta/\nu = 0.485(18)$ и $\omega = 0.461(55)$ для сильно неупорядоченной модели Изинга. Полученные значения критических индексов для сильно неупорядоченных систем находятся в хорошем соответствии с результатами компьютерного моделирования: $\beta/\nu = 0.46(4)$, $z = 2.53(3)$ [201], $z = 2.58(9)$ [123], $\beta/\nu = 0.437(21)$ [130].

6.3. Исследование влияния начального неравновесного состояния с $m_0 = 1$

В случае исследования влияния неравновесного состояния с начальным значением намагниченности $m_0 = 1$ не возникает зависимости характеристик неравновесного критического поведения от нового динамического показателя θ' . Исследования показали, что динамический процесс, начинающийся с полностью упорядоченного состояния ($m_0 = 1$), более предпочтителен из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты. В критической области $\tau \ll 1$ для временного поведения намагниченности справедлива следующая зависимость

$$m(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} m(1, t^{1/\nu z} \tau) = t^{-\beta/\nu z} \left(1 + at^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2)\right), \quad (6.9)$$

где в пределе $\tau \rightarrow 0$, оно приобретает вид:

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (6.10)$$

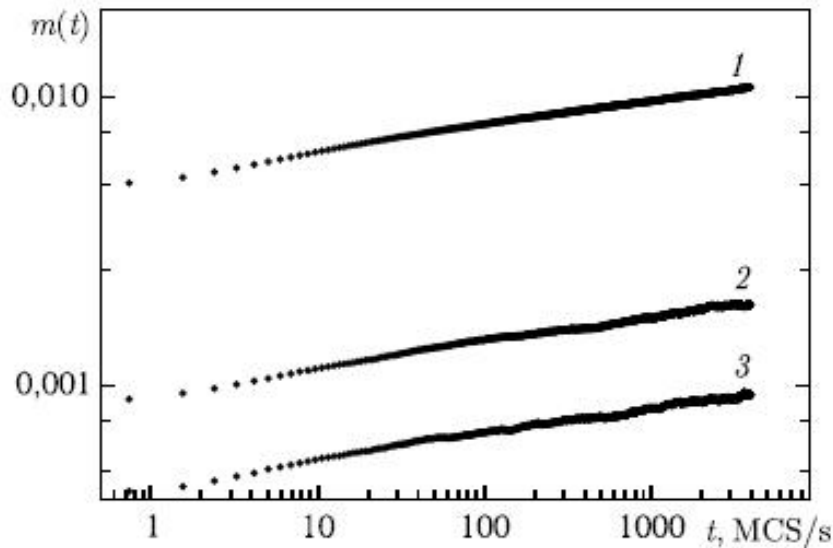


Рисунок 6.5 Временные зависимости критического поведения намагниченности $m(t)$ для систем со спиновой концентрацией $p = 0.60$ при начальных значениях $m_0 = 0.005(1)$; $0.001(2)$; $0.0005(3)$ в двойном логарифмическом масштабе.

Представляя (6.9) в виде $\ln m(t, \tau) = (-\beta/\nu z) \ln t + \ln m(1, t^{1/\nu z} \tau)$ и диф-

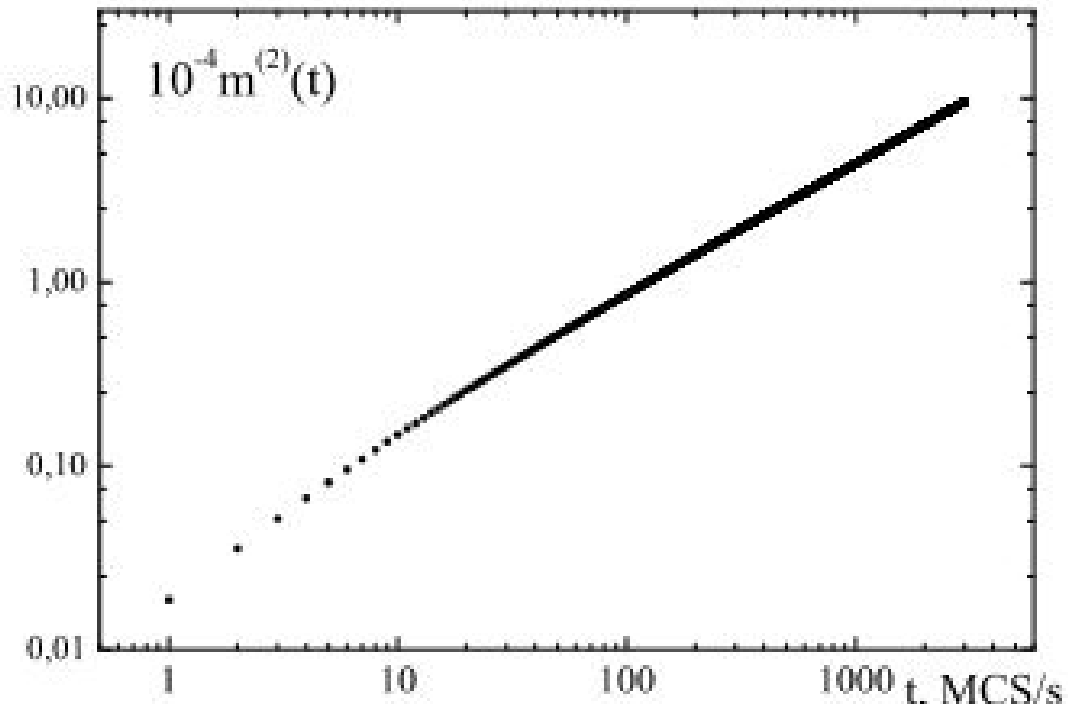


Рисунок 6.6 Временная зависимость критического поведения второго момента намагниченности $m^{(2)}(t)$ для системы с $p = 0.60$ в двойном логарифмическом масштабе.

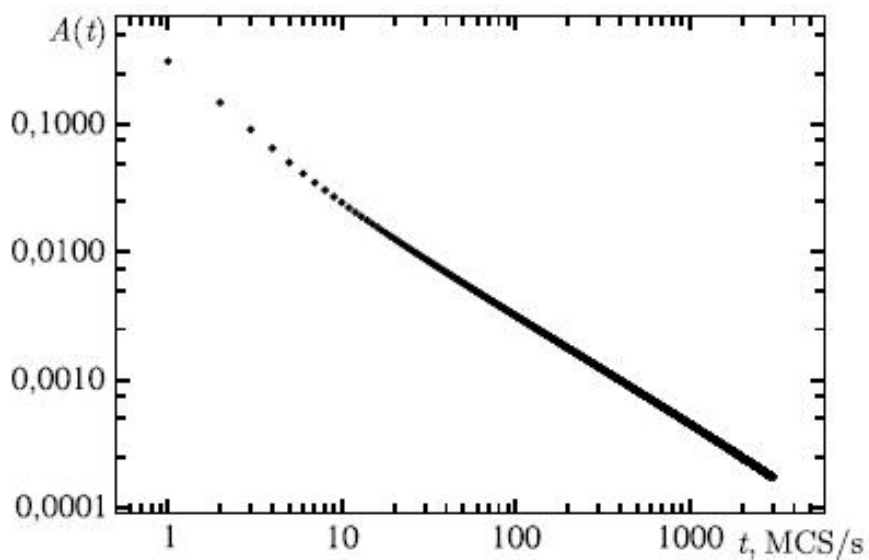


Рисунок 6.7 Временная зависимость критического поведения автокорреляционной функции $A(t)$ для системы с $p = 0.60$ в двойном логарифмическом масштабе.

ференцируя по τ можно получить соотношение для логарифмической произ-

водной намагниченности

$$\partial_\tau \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}. \quad (6.11)$$

Другой характеристической величиной, определяющей неравновесное критическое поведение является кумулянт Биндера, характеризуемый выражением

$$U_2(t) = m^{(2)}/(m)^2 - 1. \quad (6.12)$$

Размерный анализ показывает, что в критической точке поведение кумулянта Биндера описывается степенным законом $U_2(t) \sim t^{d/z}$. Численное определение намагниченности, ее логарифмической производной и кумулянта Биндера позволяет рассчитать динамический индекс z и статические индексы β и ν .

Осуществлялось моделирование кубических решеток с размерами $L = 128$ при критических температурах $T_c = 4.26267, 3.49948, 2.42413$ и 1.84509 [102] для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95, 0.80, 0.60$ и 0.50 , соответственно. Временное поведение намагниченности и кумулянта Биндера исследовалось для слабо неупорядоченных систем на временах до 1200 MCS, а для сильно неупорядоченных систем на временах до 3000 MCS. Для систем с $p = 0.95$ проводилось усреднение вычисляемых величин по 6000 различным примесным конфигурациям, с $p = 0.80$ — по 5000, $p = 0.60$ — по 10000 и $p = 0.50$ — по 7000 примесным конфигурациям. Для вычисления логарифмической производной $\partial_\tau \ln m$ осуществлялся расчет намагниченности для двух температур, смещенных относительно T_c на интервал $\Delta T = \pm 0.005$.

На рисунке 6.8 представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные временные зависимости для намагниченности $m(t)$ (рисунок 6.8а), кумулянта $U_2(t)$ (рисунок 6.8б) и логарифмической производной намагниченности $\partial \ln m(t)$ (рисунок 6.8в) для спиновых концентраций $p = 0.95, 0.80, 0.60, 0.50$. В слабо неупорядоченных системах с $p = 0.95; 0.80$ в отличие от поведения однородных систем может быть 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 ре-

жим поведения неупорядоченной системы. Для сильно неупорядоченных систем динамического режима с характеристиками однородной системы не наблюдается. Был проведен расчет значений критических показателей $\beta/\nu z$ для намагниченности, d/z для кумулянта Биндера и $1/\nu z$ для логарифмической производной намагниченности, соответствующие им суммарные погрешности, а также показатели ω/z для этих величин, соответствующие минимальным погрешностям процедуры аппроксимации (6.8). Наряду с аппроксимационной погрешностью для показателей определялась их статистическая погрешность. Для этого общее количество используемых для усреднения примесных конфигураций делилось на 5 групп. Для каждой из групп вычислялись показатели $\beta/\nu z$, d/z и $1/\nu z$, а затем вычислялись отклонения от показателей, найденных при использовании усредненных по общему количеству примесных конфигураций значений $m(t)$, $U_2(t)$ и $\partial \ln m(t)$.

На основе данных значений показателей 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 с совпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований.

Для сильно неупорядоченных систем с $p = 0.60$ значения соответствующих критических индексов $z = 2.525(15)$, $\beta/\nu = 0.496(15)$, $\nu = 0.682(13)$, $\beta = 0.339(12)$, $\omega = 0.286(10)$ и для систем с $p = 0.5$ значения индексов $z = 2.664(37)$, $\beta/\nu = 0.443(7)$, $\nu = 0.760(30)$, $\beta = 0.337(19)$, $\omega = 0.242(4)$.

Полученные значения находятся в хорошем согласии в пределах погрешностей со значениями критических индексов, полученными при моделировании критического поведения систем с аналогичными спиновыми концентрациями из начального состояния с $m_0 \ll 1$.

Итоговые значения полученных критических индексов при моделировании из различных начальных состояний представлены в таблице 6.3.

Сопоставление полученных значений критических индексов с результата-

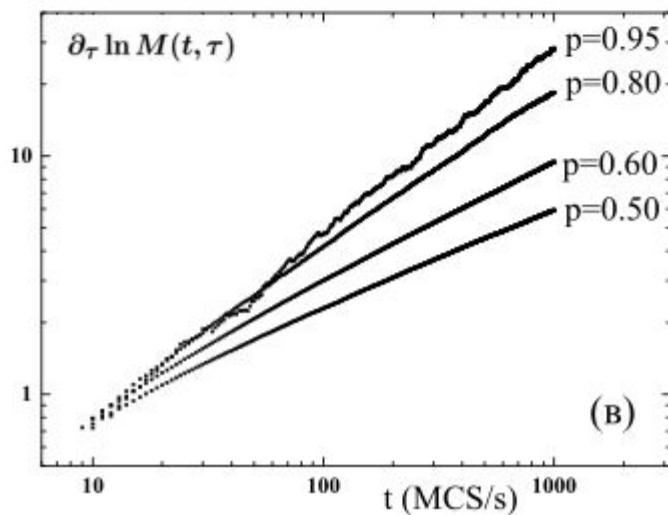
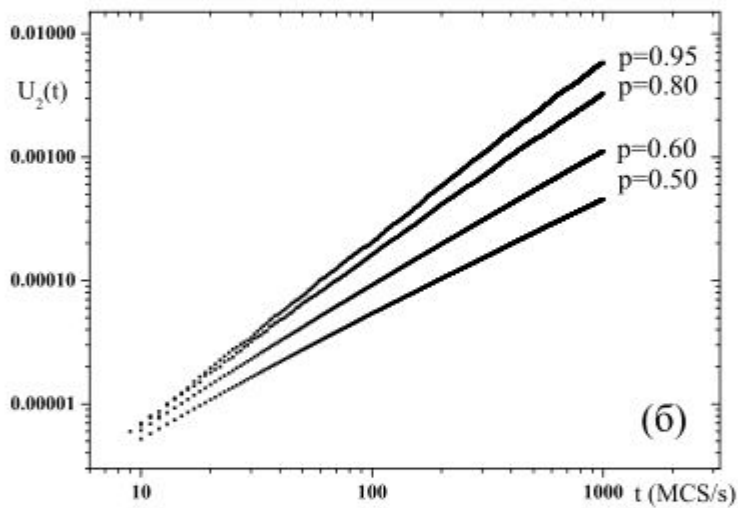
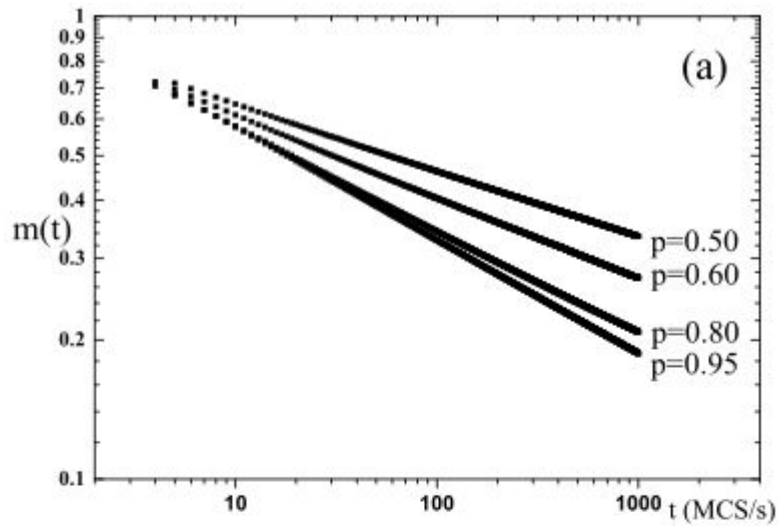


Рисунок 6.8 Временные зависимости для намагниченности $m(t)$ (а), кумулянта $U_2(t)$ (б) и логарифмической производной намагниченности $\partial \ln m(t)|_{\tau=0}$ (в) для различных спиновых концентраций p .

ми работ по компьютерному моделированию показывает, что найденные нами значения находятся в достаточно хорошем соответствии с этими результатами, где для слабо неупорядоченных систем были получены значения $\nu = 0.684(5)$, $\beta = 0.355(3)$, $\beta/\nu = 0.519(8)$, $\omega = 0.370(63)$ [124], $\nu = 0.683(3)$, $\beta = 0.354(2)$ [98], $\nu = 0.693(5)$, $\gamma = 1.342(7)$, $\omega = 0.26(13)$ [102], $z = 2.20(8)$ [123], а также с результатами теоретико-полевого описания, где для слабо неупорядоченных систем были найдены следующие значения: $\nu = 0.678(10)$, $\beta = 0.349(5)$, $\beta/\nu = 0.515(15)$, $\omega = 0.25(10)$ [121], $z = 2.1792(13)$ [161] и результатами экспериментальных исследований изинговских магнетиков, дающих $\nu = 0.69(1)$, $\beta = 0.350(9)$ (результаты представлены в обзоре [18]), $z = 2.18(10)$ [200]. Полученные значения критических индексов для сильно неупорядоченных систем находятся в хорошем соответствии с результатами: $\nu = 0.72(2)$, $\beta = 0.33(2)$, $\beta/\nu = 0.46(4)$, $z = 2.53(3)$ [122], $z = 2.58(9)$ [148], $\nu = 0.717(7)$, $\beta = 0.313(12)$, $\beta/\nu = 0.437(21)$ [130].

6.4. Коротковременная динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем

В ряде работ, посвященных описанию критической динамики разбавленной трехмерной модели Изинга как в результате применения ренормгруппового подхода, так и методов компьютерного моделирования было показано, что наличие дефектов структуры проявляется наиболее сильно в изменении значений динамического критического индекса z , характеризующего аномальный рост времени релаксации системы с приближением к температуре фазового перехода, по сравнению с изменением значений статических критических индексов. Поэтому в представленной работе для выявления влияния структурного беспорядка на динамические критические свойства трехмерной модели Изинга с концентрацией спинов $p = 0.8$ и $p = 0.6$ был применен метод динамики возмущения начального состояния системы. Этот метод компьютерного моделирования получил применение как инструмент численной оценки критической температуры и критических индексов [129, 203–205].

В рамках данного метода исследуется развитие двух конфигураций спи-

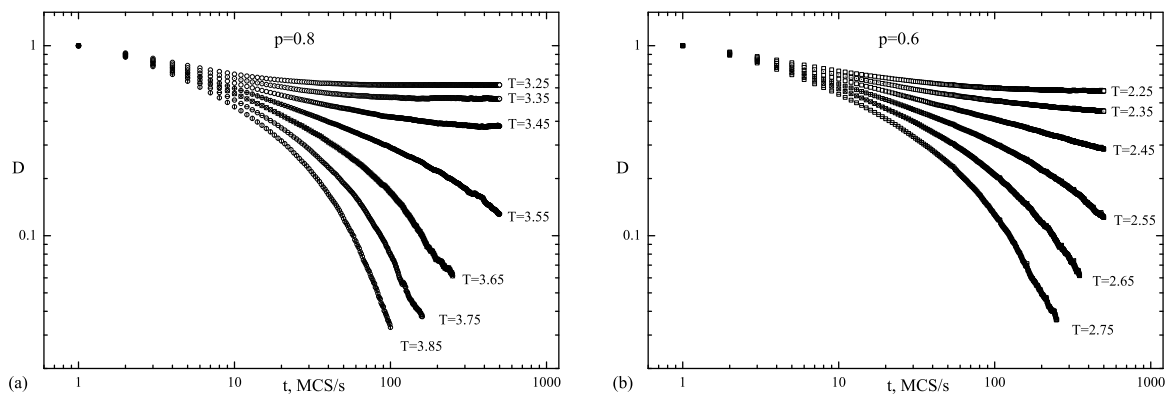


Рисунок 6.9 Поведение $D(t)$ для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$, при различных температурах

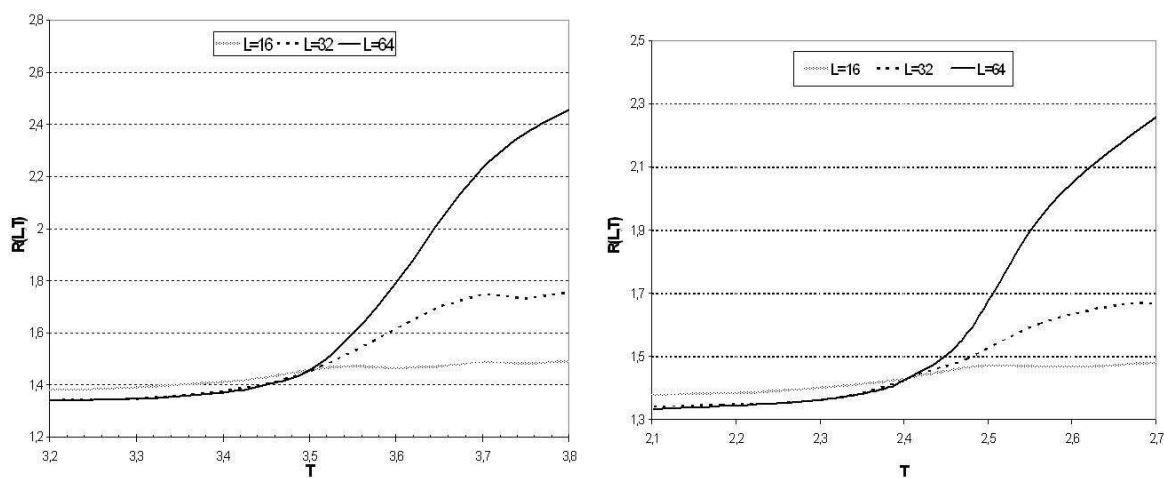


Рисунок 6.10 Зависимость функции $R(L, T)$ от температуры для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$

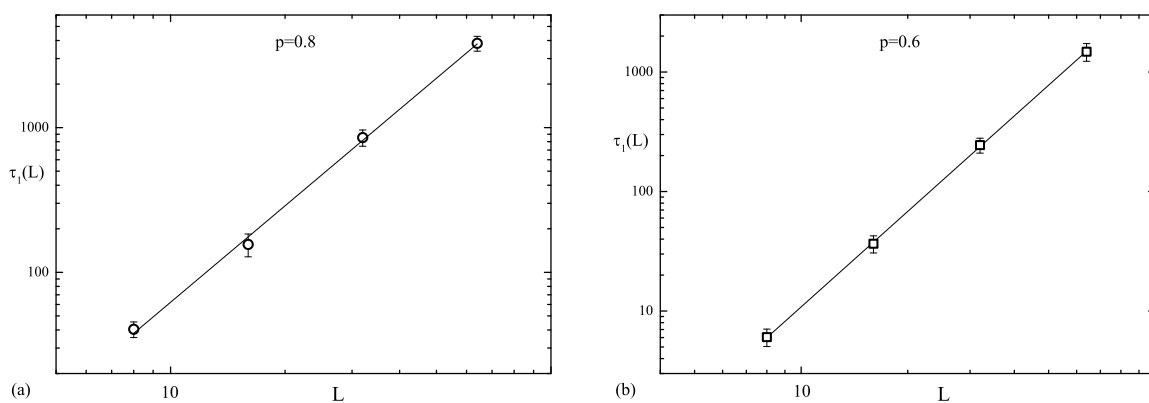


Рисунок 6.11 Зависимость времени релаксации от линейного размера решетки L ($L = 8, 16, 32, 64$) для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$

нов (для определенности обозначим их А и В), эволюционирующих с одинаковой динамикой и одинаковой последовательностью случайных чисел. На каждом временном шаге рассматривается различие между данными спиновыми конфигурациями в узлах с одинаковыми пространственными координатами. Величина, характеризующая различие между такими системами, называется расстоянием Хемминга (Hamming distance). Математически ее можно представить в следующем виде [129, 203–205]:

$$D(L, T, t) = \frac{1}{2N_s} \sum_{i=1}^{N_s} |S_i^A(t) - S_i^B(t)|, \quad (6.13)$$

где $N_s = pL^d$ - число спинов находящихся в одной спиновой конфигурации. В общем случае, расстояние Хемминга между спиновыми конфигурациями зависит от температуры T , времени моделирования t , линейного размера решетки L , граничных условий и начального состояния спиновых конфигураций $S_i^A(0)$ и $S_i^B(0)$. Для того что бы уменьшить погрешности проводимых вычислений необходимо осуществлять неоднократное повторение эксперимента с использованием различных примесных конфигураций, поэтому при расчете результатов целесообразно использовать среднее значение величины $D(L, T, t)$:

$$\langle D(L, T, t) \rangle = \frac{1}{N_I} \sum_{j=1}^{N_I} D_j(L, T, t), \quad (6.14)$$

где $D_j(L, T, t)$ - расстояние для j -ого независимого испытания. N_I - число испытаний. При проведении компьютерного моделирования было выбрано низкотемпературное начальное состояние, в котором система является полностью упорядоченной, т.е. все спины системы ориентированы в одном направлении. Рассматривались две спиновые конфигурации с взаимно противоположными по направлению приведенными суммарными значениями магнитного момента равными по модулю единице:

$$\{S_i^A(0)\} = -\{S_i^B(0)\} = 1. \quad (6.15)$$

С целью выявления влияния динамики эволюции системы на величину значений критических показателей, было проведено два независимых исследования

с выбором различных типов эволюции спиновых систем, с последующим применением метода динамики возмущения начального состояния системы. Для численной реализации эволюции спиновых систем был применен алгоритм Метрополиса с динамикой односпиновых переворотов. При исследовании поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга с линейным размером решетки $L = 32$ на временном промежутке $t = 500MCS/s$ при различных температурах (рисунок 6.10), были выявлены две температурные области. В первой, убывающая функция $D(t)$ характеризуется малыми изменениями и достаточно быстро приходит к некоторому равновесному постоянному значению. Вторая область характеризуется сильно убывающей функцией $D(t)$, не стремящейся к постоянной величине. Исходя из такого поведения функции расстояния Хемминга, можно сделать заключение, что температура фазового перехода находится в температурном промежутке между двумя этими областями. Результаты проведенных исследований поведения $D(t)$ для трехмерной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 0.8$ и $p = 0.6$ представлены на рисунке 6.9.

В соответствии с данными результатами, критическую температуру исследуемых систем можно оценить как $T_c = 3.50(5)$ для $p = 0.8$ и $T_c = 2.40(5)$ для $p = 0.6$. Более точные значения критических температур можно получить с использованием методов конечномерной теории скейлинга. Для этого введем характеристическое время τ_1 и квадрат времени τ_2 их скейлинговые зависимости в виде [129]:

$$\tau_1(L, T) = \frac{\sum_t \langle t D(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (6.16)$$

$$\tau_2(L, T) = \frac{\sum_t \langle t^2 D(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (6.17)$$

$$\tau_1(L, T) = u(L) f_1(v(L)(T - T_c)), \quad (6.18)$$

$$\tau_2(L, T) = u^2(L) f_2(v(L)(T - T_c)). \quad (6.19)$$

Из выражений (6.18) - (6.19) следует, что отношение данных времен

$$R(L, T) = \frac{\tau_2(L, T)}{\tau_1^2(L, T)} \quad (6.20)$$

Таблица 6.4 Значения критической температуры для трехмерной модели Изинга с концентрацией спинов $p = 0.8$ и $p = 0.6$

	$T_c(p = 0.8)$	$T_c(p = 0.6)$
данная работа	3.500(7)	2.498(7)
S. Wiseman, 1998 [130]	3.49942(1)	2.42418(5)
H.O. Heuer, 1993 [201]	3.4992(5)	2.4220(6)
A.K. Муртазаев, 2004 [17]	3.4956(6)	2.4178(6)
P. Calabrese, 2003 [98]		3.49962(24)
H.G. Ballesteros, 1998 [98]		3.49972(47)
J.S. Wang, 1989 [154]	3.4959(2)	2.4178(2)
B.B. Прудников, 2007 [102]	3.49948(18)	2.42413(9)

при $T = T_c$ не будет зависеть от линейного размера решетки L . Таким образом, если построить характеристические кривые для величины $R(L, T)$ как функции температуры для различных L , то они пересекутся в точке, соответствующей критической температуре. Полученные кривые температурной зависимости $R(L, T)$ для систем с линейными размерами решеток $L = 16, 32, 64$ показаны на рисунке 6.10. Проведенные исследования позволили получить следующие результаты: для $p = 0.8$ $T_c = 3.500(7)$, для $p = 0.6$ $T_c = 2.498(7)$. Вычисленные значения критических температур находятся в хорошем соответствии с результатами, полученными для данных систем в других работах (Таблица 6.4). При температурах близких к температуре фазового перехода наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации параметра порядка с эффектами сильной пространственной и временной корреляции. В качестве величины, характеризующей такие флуктуации, выступает корреляционная длина $\xi(T)$ - средний линейный размер магнитных доменов, как макроскопических областей с сильно коррелированными спинами. Из-за долгоживущих флуктуаций параметра порядка и эффектов сильной корреляции время релаксации системы τ_r в окрестности T_c неограниченно возрастает. Для описания критического замедления времени релаксации системы вводят динамический критический индекс z :

$$\tau_r \sim \xi(T)^z. \quad (6.21)$$

При моделировании конечных систем рост корреляционной длины $\xi(T)$ вблизи критической температуры T_c ограничивается размером системы L , то есть, $\xi(T) \sim L$. В результате, для времени релаксации системы вблизи крити-

ческой температуры будет справедливым соотношение:

$$\tau_r \sim L^z. \quad (6.22)$$

В рамках метода динамики возмущения начального состояния в качестве времени релаксации системы выступает введенное в (6.16) характеристическое время $\tau_1(L, T)$. Таким образом, для вычисления критического динамического индекса z нам требуется исследовать зависимость времени $\tau_1(L, T)$ от линейного размера решетки при соответствующей критической температуре. При реализации численного эксперимента рассматривались кубические решетки с линейными размерами $L = 8, 16, 32, 64$. Результаты линейной аппроксимации зависимости полученных значений τ_1 от размера L данных решеток, осуществленной в двойном логарифмическом масштабе, представлены на рисунке 6.11.

В итоге анализа проведенных аппроксимаций были получены следующие значения критического индекса z для трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга с исследуемыми спиновыми концентрациями: $z(0.8) = 2.21(6)$ и $z(0.6) = 2.61(7)$.

В работе нами были также учтены ведущие поправки к асимптотической зависимости времени релаксации вследствие влияния конечности моделируемых систем, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе:

$$\tau_r = AL^z(1 + BL^{-\omega}), \quad (6.23)$$

где ω - критический индекс поправки к скейлингу. Значения ω для различных спиновых концентраций были взяты из работы [102]: $\omega(0.8) = 0.23(13)$, $\omega(0.6) = 0.28(15)$. С учетом поправки к скейлингу были получены следующие значения: $z(0.8) = 2.28(7)$, $A(0.8) = 0.21$, $B(0.8) = 0.91$ и $z(0.6) = 2.67(8)$, $A(0.6) = 0.02$, $B(0.6) = 0.147$.

Для сопоставления полученных значений в Таб.6.5 представлены результаты других работ по определению динамического индекса z для трехмерной модели Изинга с различными спиновыми концентрациями

Сравнение полученных значений критического индекса z с результатами других работ по определению данного показателя с использованием методов компьютерного моделирования показывает, что значение z для образ-

цов с концентрацией спинов $p = 0.8$, определенное в данной работе, находится в достаточно хорошем соответствии со значениями, полученными в работах [123, 148, 188, 201, 208], и значительно отличается от результатов работы [207]. Так, в работе [207] был проведен анализ численного исследования критической динамики трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией, изменяющейся в широком интервале. Авторы исходя из идеи универсальности критического поведения неупорядоченных систем для всех концентраций дефектов выделили асимптотическое значение индекса $z = 2.62(7)$ с учетом эффектов влияния ведущих поправок к скейлингу для динамической восприимчивости системы. При этом полученное в [207] значение индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.50(13)$ находится в сильном несоответствии с результатами теоретико-полевого расчета $\omega = 0.25(10)$ [121], а также с результатами численного исследования той же модели, давшими $\omega = 0.37(6)$ [124] и $\omega(0.8) = 0.23(13)$ [102]. Для сильно-неупорядоченной системы с концентрацией спинов $p = 0.6$ результаты нашей работы с $z(0.6) = 2.67(8)$ хорошо согласуются с результатами работ [123, 201] и той же работой [207]. Из таблицы 2 наглядно видно, что в большинстве работ выявлено существенное увеличение динамического индекса z с увеличением содержания примесей в системе. Основываясь на этом, можно в действительности говорить о неуниверсальности критического поведения для неупорядоченной модели Изинга. Изменение типа критического поведения при концентрации спинов $p > 0.69$ мы связываем с появлением в системе протяженных примесных кластеров с длиной связности сравнимой с корреляционной длиной системы. Для кубической решетки спинов при концентрации примесей в ней равной 0.3117 примесный кластер имеет фрактальную размерность $d_f = 2.54$ [90], что соответствует параметру a в модели Вейнриба-Гальперина с дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов, характеризуемой функцией $g(r) \sim r^{-a}$ [75, 163, 165, 209, 210]. С увеличением концентрации примесей, вплоть до порога спиновой перколяции, в системе существует как протекающий примесный кластер сложной структуры с длиной связности сравнимой с корреляционной длиной, так и множество малых кластеров. При этом в системе одновременно сосуществуют протяженные плоские, линейные и объемные дефекты с различной длиной связности. Влияние этих дефектов и приводит к критическому поведению отличному от критического поведения для слабо-неупорядоченной модели Изинга. В результате, можно

Таблица 6.5 Значения критического индекса z и сравнение с результатами других работ

	Индекс z
данная работа $p = 0.8$	2.21(6)
данная работа $p = 0.6$	2.61(7)
В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, 1993 [123]	
$p=0.95$	2.19(7)
$p=0.8$	2.20(8)
$p=0.6$	2.58 (9)
Н.-О. Heuer, 1993 [201]	
$p=0.95$	2.16(1)
$p=0.9$	2.232(4)
$p=0.8$	2.38(1)
$p=0.6$	2.53(3)
В.В. Прудников, 2010 [188]	
$p=0.95$	2.185(25)
$p=0.8$	2.208(32)
Parisi et. al., 1999 [207]	
$p=0.8, p=0.6, p=0.95$	2,62(7)
Hasenbusch et. al., 2007 [208]	
$p=0.8, p=0.6$	2,35(2)

предсказывать как минимум два типа универсального критического поведения в структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга, соответствующих поведению слабо неупорядоченных систем со спиновой концентрацией $p_c^{(imp)} < p < 1$ и сильно неупорядоченных систем с $p_c^{(s)} < p < p_c^{(imp)}$, где $p_c^{(imp)}$ и $p_c^{(s)}$, соответственно, пороги примесной и спиновой перколяции (для кубических решеток в приближении взаимодействия ближайших соседей $p_c^{(s)} = 0.3117$ и $p_c^{(imp)} = 1 - p_c^{(s)} = 0.6883$). Вблизи границ данных интервалов спиновой концентрации можно ожидать влияния кроссоверных эффектов для слабо неупорядоченных систем со стороны критического поведения "чистых" систем с $p = 1$ (см. результаты работы [188]) и критического поведения вблизи порога примесной перколяции, а для сильно неупорядоченных систем - со стороны критического поведения вблизи порогов примесной и спиновой перколяции. Данные представления позволяют более адекватно объяснить весь накопленный материал по описанию как равновесного, так и неравновесного критического поведения в структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга.

6.5. Выводы

На основе проведенных в данной главе численных исследований равновесного и неравновесного критического поведения как слабо неупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p = 0.95$ и $p = 0.80$, так и сильно неупорядоченных систем с $p = 0.60$ и $p = 0.50$ можно сделать следующие выводы:

1. Значения статических критических индексов и скейлинговые функции для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального равновесного критического поведения для неупорядоченной модели Изинга с различными характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем;
2. Метод коротковременной динамики позволяет адекватно описывать критическое поведение структурно неупорядоченных систем, а полученные значения как статических, так и динамических критических индексов находятся в соответствии с результатами численного исследования подобных систем другими методами;
3. При численном исследовании структурно неупорядоченных систем методом коротковременной динамики в отличие от аналогичных исследований критического поведения чистых систем выявлено два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением измеряемых величин, а именно: на раннем временном интервале реализуется неравновесное критическое поведение, соответствующее поведению однородной системы, и лишь затем, проходя через некоторый интервал кроссоверного поведения реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы;
4. Сопоставление значений критических индексов, полученных в результате численных исследований, с рассчитанными в рамках теоретико-полевого описания $\theta' = 0.106(8)$ и $z = 2.202(2)$ (усредненные результаты применения различных методов суммирования) показывает их достаточно хорошее согласие при заметно более лучшем согласии с результатами применения метода Паде-Бореля-Лероя $\theta' = 0.120$ и $z = 2.198$;

5. Проведенные численные исследования показали, 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 ;
6. 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 теоретико-полевого описания, результатами моделирования критического поведения другими методами, а также согласуются с результатами экспериментальных исследований слабо неупорядоченных изинговских магнетиков;
7. Значения динамического критического индекса z , полученные в данной работе для сильно неупорядоченных систем из разных начальных неравновесных состояний, находятся в хорошем согласии друг с другом, а также согласуются со значениями, полученными в работах [123] и [201] другими численными методами, а значение динамического критического индекса коротко-временной эволюции намагниченности $\theta' = 0.167(18)$ носит оригинальный характер.

Глава 7

Исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении однородных и структурно неупорядоченных магнетиков

В последние годы исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает значительный интерес как с теоретической, так и экспериментальной точек зрения [43, 211, 212]. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризваемыми нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Хорошо известными примерами подобных систем с медленной динамикой и эффектами старения являются такие комплексные неупорядоченные системы, как спиновые стекла [44, 144]. Однако данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [213] могут наблюдаться и в системах, испытывающих фазовые переходы второго рода, так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации. Отметим, что 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, оказывается новой универсальной характеристикой для критического поведения различных систем [98].

В данной главе рассматриваются результаты численного исследования для таких универсальных величин как флуктуационно-диссипативное отношение, критические показатели, характеризующие неравновесную критическую динамику различных статистических моделей. Представлены результаты численного исследования методами Монте-Карло особенностей влияния дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных спиновых систем. Изучение релаксационной динамики подобных систем, с одной стороны, проводить значительно легче, чем таких сложных неупорядоченных систем, как спиновые стекла, а с другой стороны, эти системы на неравновесном этапе критической эволюции демонстрируют аналогичные спиновым стеклам эффекты старения и отклонение предельной величины флуктуационно-диссипативного отношения от единицы как показа-

теля неравновесности системы.

Ренормгрупповые [197, 214], численные [102, 188, 215] и экспериментальные [200] методы исследования критической динамики структурно неупорядоченных систем позволили к настоящему времени однозначно установить, что присутствие в системах как некоррелированных дефектов структуры, так и дефектов с эффектами дальнедействующей корреляции приводит к новым типам критического поведения и заметному усилению эффектов критического замедления по сравнению с <чистыми> системами. В связи с этим особенности неравновесного поведения, такие как эффекты старения, несомненно должны найти более яркое проявление в структурно неупорядоченных системах с новыми универсальными значениями флуктуационно-диссипативного отношения.

Ренормгрупповые расчеты флуктуационно-диссипативного отношения, проведенные в работах [95] в рамках метода ε -разложения для диссипативной модели с несохраняющимся параметром порядка в низших порядках теории, показали, что сложности выделения флуктуационных поправок в двухвременных зависимостях для корреляционной функции и функции отклика не позволяют пока с достаточной убедительностью выявить характер влияния дефектов на относительное соответствие значений предельного флуктуационно-диссипативного отношения для структурно неупорядоченной и «чистой» модели Изинга. Представленные в данной главе численные Монте-Карло исследования, непerturbативные по своей основе, позволяют более однозначно ответить на этот вопрос и выделить влияние дефектов структуры на эффекты старения и значения флуктуационно-диссипативного отношения в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга. В данной разделе представлены исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга при ее эволюции из начального высокотемпературного состояния. Для исследования нарушения флуктуационно-диссипативную теоремы в структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга мы применили методику, позволяющую при моделировании динамики системы с помощью алгоритма тепловой бани получить функцию отклика без введения магнитного поля, выразив ее через специальную двухвременную корреляционную функцию.

Представленные в данной главе результаты исследований опубликованы в работах [107, 216–218]. Результаты приведенные в данной в главе получены сов-

местно с В.В.Прудниковым, П.В. Прудниковым, Е.А. Поспеловым Личный вклад автора заключается в получении результатов для концентраций спинов $p = 0.95$ и $p = 0.5$, проведении значительной части расчетов, анализе, интерпретации полученных данных и является определяющим.

7.1. Методика определения функции отклика и флуктуационно-диссипативного отношения при применении алгоритма тепловой бани

Опишем методику определения двухвременной зависимости функции отклика для модели Изинга в рамках применения алгоритма тепловой бани. Как известно, динамическая эволюция модели в критической точке является марковским процессом. Обозначим за $\varphi(\{S\}, t)$ вероятность нахождения системы в состоянии с конфигурацией спинов $\{S\}$ в момент времени t . Основное кинетическое уравнение для случая дискретного времени может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \varphi(\{S\}, t + \Delta t) = & (1 - \Delta t) \varphi(\{S\}, t) + \\ & + \Delta t \sum_{\{S'\}} W(\{S'\} \rightarrow \{S\}, t) \varphi(\{S'\}, t). \end{aligned} \quad (7.1)$$

$W(\{S'\} \rightarrow \{S\}, t)$ — вероятность перехода из состояния $\{S'\}$ в состояние $\{S\}$ в момент времени t , удовлетворяющая условию нормировки:

$$\sum_{\{S'\}} W(\{S'\} \rightarrow \{S\}, t) = 1$$

. Можно показать, что аналогичному кинетическому уравнению удовлетворяет и условная вероятность перехода $\varphi(\{S\}, t | \{S'\}, t_w)$ — вероятность обнаружения системы в момент времени t в состоянии S , при условии, что в момент времени $t > t_w$ система находилась в состоянии $\{S'\}$:

$$\begin{aligned} \varphi(\{S\}, t + \Delta t | \{S'\}, t_w) = & (1 - \Delta t) \varphi(\{S\}, t | \{S'\}, t_w) + \\ & + \Delta t \sum_{\{S''\}} W(\{S''\} \rightarrow \{S\}, t) \varphi(\{S''\}, t, \{S'\}, t_w). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Данная условная вероятность вводится с помощью формулы Байеса:

$$\varphi(\{S\}, t) = \sum_{\{S''\}} \varphi(\{S\}, t | \{S'\}, t_w) \varphi(\{S'\}, t_w). \quad (7.3)$$

Используя кинетическое уравнение (7.1) и формулу Байеса, среднее значение спина $\langle S_j \rangle$ в момент времени $t > t_w$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \langle S_j \rangle &= \sum_{\{S\}} S_j \varphi(\{S\}, t) = \sum_{\{S\}, \{S'\}} S_j \varphi(\{S\}, t | \{S'\}, t_w + \Delta t) \times \\ &\times \left[(1 - \Delta t) \varphi(\{S'\}, t_w) + \Delta t \sum_{\{S''\}} W_k(\{S''\} \rightarrow \{S'\}) \varphi(\{S''\}, t_w) \right]. \end{aligned} \quad (7.4)$$

При нахождении функции отклика в соответствии с (1.125) нас будет интересовать производная $\partial \langle S_j(t) \rangle / \partial h_i$ в пределе $h_i \rightarrow 0$. Поскольку в (7.2) только W_k зависят от поля h_i через выражение (7.19) и гамильтониан, то после дифференцирования получим выражение

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \langle S_j(t) \rangle}{\partial h_i} \right|_{h_i \rightarrow 0} &= \Delta t \delta_{k,j} \sum_{\{S\}, \{S'\}, \{S''\}} S_j \varphi(\{S\}, t | \{S'\}, t_w + \Delta t) \times \\ &\times \left[\frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{S''\} \rightarrow \{S'\}) \right]_{h_i \rightarrow 0} \varphi(\{S''\}, t_w). \end{aligned} \quad (7.5)$$

Данная производная определяет обобщенную восприимчивость системы для случая инфинитезимального магнитного поля, приложенного к спину в узле i и действующего во временном интервале $[t_w, t_w + \Delta t]$:

$$\chi_{ji}(t, [t_w, t_w + \Delta t]) = \frac{\partial \langle S_j(t) \rangle}{\partial h_i}. \quad (7.6)$$

Дифференцирование вероятности перехода в (7.5) с учетом (7.19) дает выражение

$$\left. \frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{S''\} \rightarrow \{S'\}) \right|_{h_i \rightarrow 0} = \beta W_i(\{S''\} \rightarrow \{S'\}) [S'_i - S_i^W], \quad (7.7)$$

где $S_i^W = \text{th} \left(\beta J \sum_{k \neq i} S'_k \right)$. В правую часть уравнения (7.7) входит вероятность перехода $W_i(\{S''\} \rightarrow \{S'\})|_{h_i=0}$, которая задает динамику односпиновых переворотов уже в отсутствие магнитного поля.

Подставляя (7.7) в (7.5), а также используя кинетические уравнения (7.1) и (7.2), после суммирования по состояниям S'' получаем обобщенную восприимчивость в виде

$$\begin{aligned} \chi_{ji}(t, [t_w, t_w + N\Delta t]) &= \beta \delta_{k,i} \times \\ &\times \sum_{\{S\}, \{S'\}} S_j \varphi(\{S\}, t | \{S''\}, t_w + N\Delta t) [S'_j - S_j^W] \times \\ &\times [\varphi(\{S'\}, t_w + N\Delta t) - (1 - N\Delta t) \varphi(\{S'\}, t_w)]. \end{aligned} \quad (7.8)$$

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

$$\chi_{ji}(t, [t_w, t_w + N\Delta t]) = \int_{t_w}^{t_w + N\Delta t} R_{ji}(t, s) ds = R_{ji}(t, t_w) N\Delta t + O(\Delta t^2). \quad (7.9)$$

Время в численном моделировании является дискретной величиной. Поэтому полагая в (7.8) и (7.9) $N\Delta t = 1$ МК/спин, получаем

$$R_{ji}(t, t_w) = \chi_{ji}(t, [t_w, t_w + 1]) = \beta \langle S_j(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle. \quad (7.10)$$

В результате выражение для функции отклика для численного Монте-Карло исследования представляется в виде

$$R(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_{ii} = \frac{1}{N} \beta \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle, \quad (7.11)$$

т. е. $R(t, t_w)$ усредняется по переворотам N спинов в течении одного шага Монте-Карло.

Двухвременная автокорреляционная функция задается выражением

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle, \quad (7.12)$$

поэтому ее производная по времени ожидания принимает следующий вид

$$\frac{\partial}{\partial t_w} C(t, t_w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i(t_w)] \rangle. \quad (7.13)$$

В соответствии с определением (1.127) и при использовании полученных выражений (7.11) – (7.13) флуктуационно-диссипативное отношение может быть вычислено на основе следующей итоговой формулы

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\frac{\partial}{\partial t_w} C(t, t_w)} = \frac{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle}{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i(t_w)] \rangle} \quad (7.14)$$

В работе [81] показывается, что для времен $t > t_w \gg t_{\text{rel}}$ при использовании в изложенной выше процедуре равновесной бoльцмановской функции распределения для обобщенной восприимчивости получается следующее выражение

$$X_{ji}^{\text{eq}}(t, [t_w, t_w + \Delta t]) = \beta \langle S_j(t) [S_i(t_w + \Delta t) - S_i(t_w)] \rangle_{\text{eq}}, \quad (7.15)$$

а при использовании соотношений (7.9) – (7.10)

$$\begin{aligned} R_{ii}^{\text{eq}}(t, t_w) &= \beta \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle_{\text{eq}} = \\ &= \beta \langle S_i(t) [S_i(t_w + \Delta t) - S_i(t_w)] \rangle_{\text{eq}} \end{aligned} \quad (7.16)$$

Таким образом, выражение (7.14) для флуктуационно-диссипативного отношения характеризуется тем, что $X(t > t_w \gg t_{\text{rel}}) = 1$ в соответствии с флуктуационно-диссипативной теоремой для квазиравновесного и равновесного состояний [219].

7.2. Исследование влияния дефектов структуры на свойства старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга

7.2.1. Модель, вычисляемые величины и параметры моделирования

Гамильтониан структурно неупорядоченной модели Изинга задается выражением:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \quad (7.17)$$

где суммирование проводится по ближайшим соседям, $S_i = \pm 1$, p_i , — числа заполнения, характеризующие наличие структурного некоррелированного беспорядка в системе: $p_i = 1$ для узла i со спином и $p_i = 0$ для узла с немагнитным атомом примеси.

Моделирование эволюции макроскопической решеточной системы из N спинов осуществлялось в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс односпиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани [220], задающим вероятность перехода спина системы в новое состояние $S_i \rightarrow S'_i$ посредством формулы:

$$W_{\text{sp}}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp[-\beta H(S'_i)]}{\sum_{S_j} \exp[-\beta H(S_j)]}, \quad (7.18)$$

где суммирование по S_j в знаменателе проводится по всем возможным состояниям спина S_i до переворота. В качестве единицы времени динамического процесса выбирается шаг Монте-Карло на спин (MCs/s), который обозначает N последовательных переворотов спинов в узлах решетки. Для модели Изинга с двумя возможными состояниями $S_j = \pm 1$ указанную вероятность переворота можно записать в виде

$$W_{\text{sp}}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp[-\beta H(S'_i)]}{\exp[\beta H(S_i)] + \exp[-\beta H(S_i)]} \quad (7.19)$$

с реализацией так называемой глауберовской динамики.

Моделировалось поведение системы изинговских спинов на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ с наложенными периодическими граничными условиями при критической температуре. Осуществлялся расчет намагниченности

$$M(t) = \left\langle \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i(t) \right\rangle \quad (7.20)$$

и двухвременной автокорреляционной функции

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - M(t) M(t_w), \quad (7.21)$$

где угловые скобки характеризуют проводимое статистическое усреднение по различным реализациям начальных конфигураций спинов и Монте-Карло про-

гонкам.

При исследовании критической релаксации систем из начального высокотемпературного состояния с малым значением намагниченности, расчет функции отклика и флуктуационно-диссипативного отношения проводился с применением соотношений [81, 221]

$$R(t, t_w) = \frac{1}{TL^3} \sum_{i=1}^{L^3} \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle, \quad (7.22)$$

где $S_i^W = \tanh\left(J \sum_{m \neq i} S_m / T\right)$, и

$$X(t, t_w) = \frac{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle}{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t_w + 1) - S_i(t_w) \rangle} \quad (7.23)$$

Данные соотношения позволяют при моделировании динамики системы с помощью алгоритма тепловой бани получать функцию отклика, а затем и флуктуационно-диссипативное отношение без введения магнитного поля. При расчетах $R(t, t_w)$ и $X(t, t_w)$ проводилось усреднение получаемых значений по Монте-Карло прогонкам для каждого t_w , так как в отличие от автокорреляционной функции величины $R(t, t_w)$ и $X(t, t_w)$ характеризуются значительно большими флуктуационными эффектами и для их определения и усреднения требуется значительно большая статистика.

Было проведено моделирование неравновесного поведения как «чистой», так и структурно неупорядоченной модели Изинга при спиновых концентрациях $p = 1.0, 0.95, 0.8, 0.6, 0.5$ на трехмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ (количество спинов в решетке $N = pL^3$). Рассматривалась эволюция системы из специально сформированного при $T \gg T_c$ высокотемпературного начального состояния с малым значением намагниченности $m_0 \ll 1$ ($m_0 = 0,02$ для $p = 1,0$, $m_0 = 0,01$ для $p = 0,8; 0,95$, и $m_0 = 0,005$ для $p = 0,6; 0,5$). После приготовления начальной конфигурации динамика системы реализовывалась 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 [102]. Поведение систем исследовалось на временах до 10 000 шагов Монте-Карло на спин. При моделировании «чистой» системы проводилось статистическое усреднение по 94 000 прогонок. При моде-

лировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 6200 примесным конфигурациям и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации.

7.2.2. Результаты моделирования

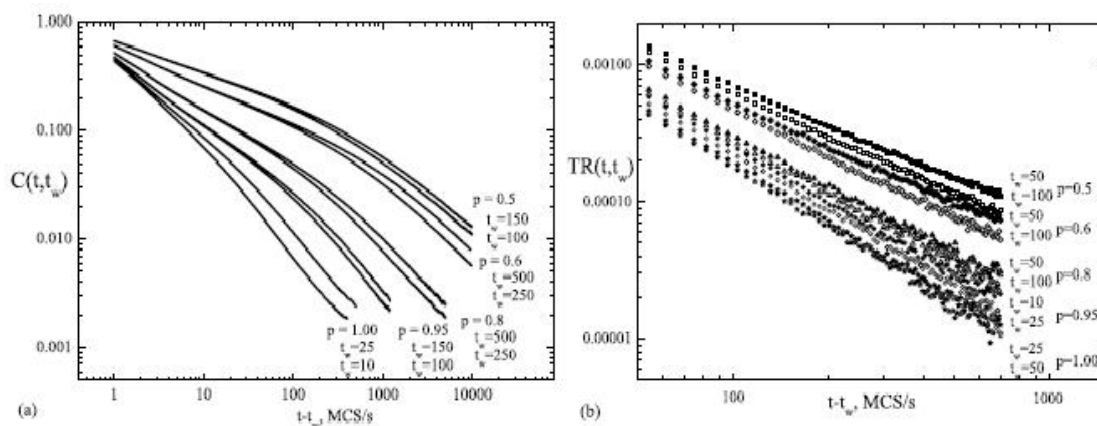


Рисунок 7.1 Временные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика $TR(t, t_w)$ для различных спиновых концентраций и времен ожидания t_w

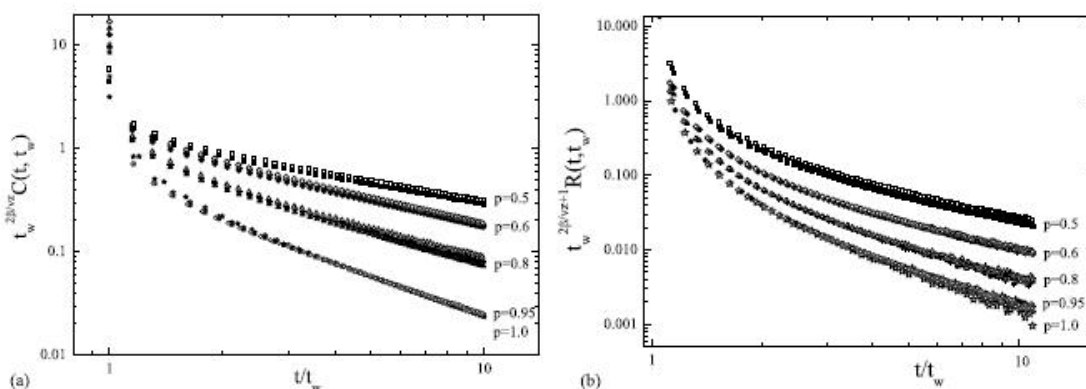


Рисунок 7.2 Скейлинговый коллапс корреляционной функции $C(t, t_w)$ (а) и функции отклика $R(t, t_w)$ (б) для различных спиновых концентраций и времен ожидания t_w

На рисунке 7.1 представлены в двойном логарифмическом масштабе полученные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и

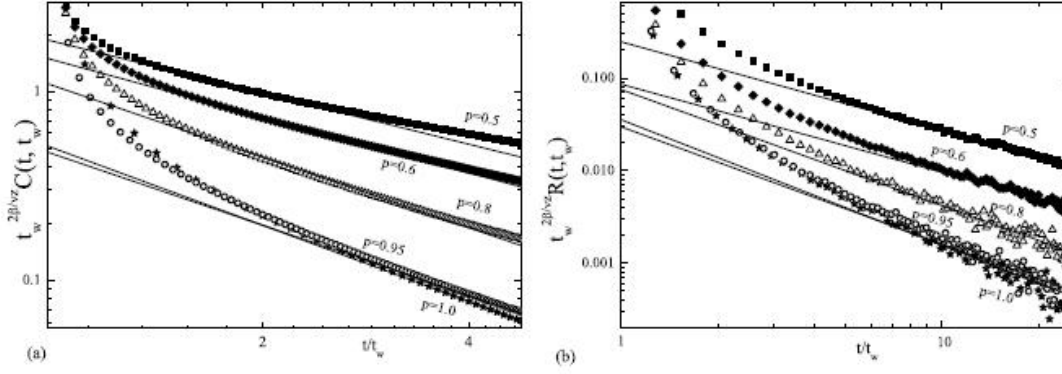


Рисунок 7.3 Скейлинговые функции для оценки показателей c_a и c_r

функции отклика $R(t, t_w)$ и от времени наблюдения $t - t_w$ для набора различных времен ожидания t_w . Наглядно видно проявление эффектов старения через зависимость $R(t, t_w)$ и $C(t, t_w)$ от <возраста> системы t_w (с увеличением возраста системы ее реакция на внешние возмущения уменьшается), а также, что с ростом концентрации дефектов (уменьшением спиновой концентрации p) релаксация системы замедляется.

На основе анализа двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика (1.130) в неравновесном процессе релаксации системы можно выделить три этапа (режима) его протекания. Первый квазиравновесный этап эволюции осуществляется для малых времен наблюдения $t - t_w \ll t_w$ с $t_w \gg 1$, когда еще не успевают проявиться зависимость автокорреляционной функции и функции отклика от времени ожидания и они демонстрируют стационарный характер своего изменения $C = C(t - t_w) \sim (t - t_w)^{-(d-2+\eta)/z}$ и $R = R(t - t_w) \sim (t - t_w)^{-(d-2+\eta+z)/z}$. Второй этап с проявлением эффектов старения реализуется на временах $t - t_w \sim t_w \gg 1$, на котором уже ярко проявляется двухвременная зависимость для автокорреляционной функции и функции отклика и характеризуется соотношениями

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} \hat{F}_c(t/t_w), \\ R(t, t_w) &\sim t_w^{-2\beta(\nu z)-1} \hat{F}_R(t/t_w), \end{aligned} \quad (7.24)$$

в которых была использована связь между критическими индексами $2\beta/(\nu z) = d/z - a - 1$. В результате для разных времен ожидания t_w кривые для данных функций, рассматриваемые на шкале времени наблюдения $t - t_w$, уже не

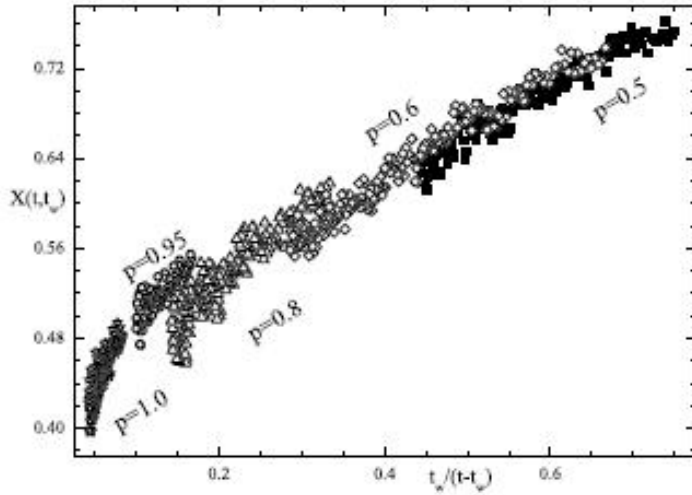


Рисунок 7.4 Функциональная зависимость флуктуационно-диссипативного отношения $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$ при $t - t_w \gg t_w$ для различных спиновых концентраций

совпадают друг с другом и при этом в соответствии с (1.131) характеризуются различным наклоном для каждого значения t_w . Для этапа с существенно неравновесной эволюцией системы с временами наблюдения $t - t_w \gg t_w \gg 1$ скейлинговые функции $\hat{F}_c(t/t_w)$ $\hat{F}_R(t/t_w)$ в (1.131) характеризуются убывающей степенной зависимостью

$$\hat{F}_c(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a}, \quad \hat{F}_R(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_r} \quad (7.25)$$

с показателем $c_a = d/z - \theta'$, совпадающим с показателем, определяющим временную зависимость автокорреляционной функции в коротковременном режиме неравновесного критического поведения системы [94, 102, 196]. На этом этапе коротковременной динамики эффекты старения не проявляются. Скейлинговый анализ поведения функции отклика $R(t, t_w)$ в режиме коротковременной динамики предсказывает, что $c_r = c_a$.

Результаты на рисунках 7.2, 7.3 демонстрируют коллапс полученных для различных t_w данных на соответствующих $p = 1, 0$, $p = 0, 95$, $p = 0, 8$, $p = 0, 6$ и $p = 0, 5$ универсальных кривых, характеризуемых скейлинговыми функциями $F_R(t/t_w)$ и $F_c(t/t_w)$ в (7.25). Мы использовали следующие значения критических индексов: $z = 2.191(21)$, $2\beta/\nu = 1.016(32)$ для $p = 0.95; 0.8$ [188] и

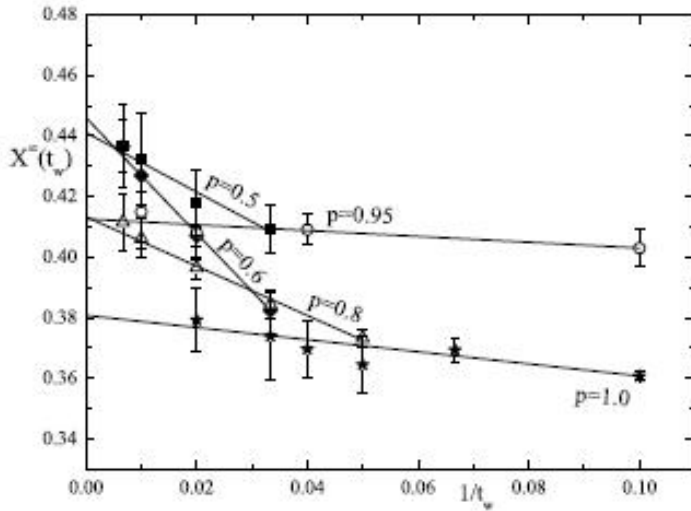


Рисунок 7.5 Функциональные зависимости ФДО $X(t_w, p)$ от $1/t_w$ для различных спиновых концентраций. Значения $X^\infty(p)$ получаются в пределе $1/t_w \rightarrow 0$ путем линейной аппроксимации

Таблица 7.1 Значения показателей скейлинговых функций c_r , c_a и предельного ФДО, полученные в пределе $t \gg t_w$

p	c_a	c_r	X^∞
$p = 1.0$	1.333(40)	1.357(18)	0,380(153)
$p = 0.95$	1.230(28)	1.264(40)	0.413(7)
$p = 0.8$	1.237(22)	1.251(22)	0.413(11)
$p = 0.6$	0.982(30)	0.950(8)	0.446(8)
$p = 0.5$	0.896(64)	0.955((33)	0.441(13)

$z = 2.663(30), 2\beta/\nu = 1.016(32)$ для $p = 0.6; 0.5$ [189].

В таблице 7.1 представлены значения показателей c_r и c_a , рассчитанные нами для различных спиновых концентраций p . Видно, что для <чистой> системы и слабо неупорядоченной системы с $p = 0,8; 0,95$ и сильно неупорядоченной системы с $p = 0,6; 0,5$ значения показателей c_r и c_a хорошо согласуются друг с другом в пределах статистических погрешностей.

На рисунке 7.4 представлено вычисленное на основе формулы (7.23) ФДО в виде функциональной зависимости $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$ при $t - t_w \gg t_w$ для систем с различными спиновыми концентрациями. Линейная аппроксимация зависимости $X(t, t_w)$ при $t_w/(t - t_w) \rightarrow 0$ дает возможность определить значения $X(t_w)$ для каждого t_w и соответствующей спиновой концентрации.

К полученным значениям $X(t_w)$ для различных времен ожидания была применена аппроксимация $X(t_w \rightarrow \infty)$, которая и позволила определить искомое предельное флуктуационно-диссипативное отношение X^∞ . Наглядное представление для осуществленной процедуры аппроксимации дано на рисунке 7.5. В таблице 7.1 приведены значения предельного ФДО для различных спиновых концентраций.

Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении чистых и структурно неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, а также на то, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению значений X^∞ .

Полученное для сильно неупорядоченной системы со спиновой концентрацией $p = 0,6; 0,5$ значение предельного флуктуационно-диссипативного отношения с $X^\infty = 0,446(10)$ демонстрирует отличие от значений $X^\infty = 0,413(10)$ для $p = 0,8; 0,95$ и $X^\infty = 0,381(16)$ для $p = 1,0$, превышающее пределы статистических погрешностей и проведенных аппроксимаций. Это позволяет сделать вывод, что новая универсальная характеристика неравновесного поведения как предельное флуктуационно-диссипативное отношение и полученные для него значения указывают на то, что неравновесное критическое поведение чистых, слабо и сильно неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, принадлежит к различным универсальным классам критического поведения. Важно отметить, что при подготовке условий, анализе экспериментальных результатов критического поведения различных систем наряду с эффектами критического замедления необходимо учитывать влияние эффектов старения, значительно усиливающих эффекты критического замедления с увеличением «возраста» образца и приводящих к влиянию начальных состояний системы. При этом присутствие дефектов структуры в системе, увеличение их концентрации приводит к существенному усилению эффектов старения.

7.3. Выводы

Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения позволяют сделать следующие выводы:

1. нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном крити-

ческом поведении «чистых» и структурно неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, а также на то, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению значений X^∞

2. неравновесное критическое поведение «чистых», слабо и сильно структурно неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, принадлежит к различным классам универсальности критического поведения;

3. присутствие дефектов структуры в системе, увеличение их концентрации приводит к существенному усилению эффектов старения.

Заключение

1. Применение суперкомпьютерных технологий при моделировании методами Монте-Карло статического и динамического критического поведения неупорядоченных систем позволило для вычисления скейлинговых функций термодинамических величин и значений равновесных и динамических критических индексов использовать усреднение по большому количеству примесных конфигураций (от 3000 - до 50000) и широкий интервал изменения линейных размеров решеток $L = 20 - 400$. Все это позволяет считать, что полученные результаты носят уникальный характер.
2. Вычисленные скейлинговые функции и значения критических индексов для корреляционной длины и восприимчивости демонстрируют существование двух классов универсального критического поведения для разбавленной модели Изинга с различными характеристиками для слабо и сильно неупорядоченных систем.
3. Впервые осуществлено компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных магнетиков и вычисление критического динамического индекса z в широкой области изменения концентрации примесей. Предложена гипотеза ступенчатой универсальности трехмерных неупорядоченных изинговских магнетиков.
4. Впервые проведено теоретико - полевое описание критической динамики магнитных однородных и неупорядоченных систем с замороженными немагнитными примесями. В рамках теоретико-полевого подхода непосредственно для трехмерных систем (т.е. без использования традиционного метода ε - разложения) получено выражение для динамических скейлинговых функций. Применяя метод суммирования Паде-Бореля к асимптотическому ряду разложения для динамических скейлинговых функций проведен расчет динамического критического индекса z . Проведен анализ влияния слабой неоднородности, создаваемой присутствием примеси, на динамическое критическое поведение двумерных изинговских систем. Осуществлен расчет динамического критического индекса z для двумерной модели Изинга.
5. Применение численного метода параллельного отжига при исследовании

низкотемпературного поведения трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели со случайными магнитными полями было наглядно показано, что для слабо неупорядоченных систем реализуется антиферромагнитное упорядоченное состояние, в то время как в области сильного структурного беспорядка эффекты случайных магнитных полей приводят к осуществлению нового фазового состояния системы. Оно характеризуется сложной доменной структурой из антиферромагнитных и ферромагнитных доменов, разделенных областями спин-стекольной фазы с реализацией спин-стекольного основного состояния системы.

6. Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении однородных и структурно-неупорядоченных магнетиков, описываемых трехмерной модели Изинга, а также на то, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению значения X^∞ . Отличия в значение X^∞ для однородных, слабо неупорядоченных и сильно неупорядоченных систем позволяют сделать вывод, что неравновесное критическое поведение однородных, слабо и сильно неупорядоченных систем относятся к различным классам универсальности критического поведения.

Перспективы дальнейшей разработки темы. По мнению автора актуальным направлением дальнейших исследований по теме диссертации является разработка методов Монте-Карло для вычисления неподвижных точек ренормгруппового преобразования эффективного гамильтониана сильно неупорядоченных магнетиков, что даст возможность вычисления критических индексов сильно неупорядоченных систем с помощью метода теоретико-полевой ренормализационной группы. Также значительный интерес представляет проведение экспериментальных работ для проверки предсказаний теории и результатов моделирования относительно влияния примесей на динамическое критическое поведение магнетиков (более высокое значение критического динамического индекса z для сильно неупорядоченных систем по сравнению с индексом z однородных и слабо неупорядоченных магнетиков.) Эти отличия могут быть зафиксированы в ряде экспериментальных методов: по неупругому рассеянию нейтронов (ширина линии $\omega_\phi \sim |T - T_c^-|^{z\nu}$ при $q = 0$ и $\omega_\phi \sim q^z$ при

$T = T_c$), в магнитных резонансных методах ЭПР и ЯМР линии резонанса $\Delta\omega \sim |T - T_c|^{(d-2+\eta-z)\nu}$, где η — индекс Фишера), измерению динамической восприимчивости на внешнее высокочастотное магнитное поле ($\chi^{(\omega)} \sim \omega^{-\gamma/z\nu}$ при $T = T_c$, где γ — индекс восприимчивости). Причем при подготовке условий, анализе экспериментальных результатов наряду с эффектами критического замедления необходимо учитывать влияние эффектов старения, значительно усиливающих эффекты критического замедления с увеличением «возраста» образца и приводящих к влиянию начальных состояний системы. Результаты полученные в диссертации могут быть применены при моделировании магнитного упорядочения в ультратонких мультислойных структурах.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации**Статьи в журналах, рекомендованных ВАК:**

1. Прудников В.В. Критическая динамика разбавленных магнетиков / В.В.Прудников, **А.Н.Вакилов** // ЖЭТФ - 1992 - Т. 101.- № 6.- С. 1853–1861.
2. Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков / **А.Н.Вакилов**, В.В.Прудников // Письма в ЖЭТФ. - 1992.- Т. 55.- № 12. С. 709–712.
3. Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков /В.В.Прудников, **А.Н.Вакилов**// ЖЭТФ. - 1993.- Т. 103.- № 3.- С. 962–969.
4. Прудников В.В. Определение критических параметров эффективного гамильтониана слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга / В.В.Прудников, **А.Н.Вакилов**, В.Н. Бородихин // Математические структуры и моделирование.- 2001.- Вып.8.- С.56-65.
5. Прудников В.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга / В.В.Прудников, П.В.Прудников,**А.Н.Вакилов**, В.Н.Бородихин // Математические структуры и моделирование.- 2003.- Вып.11.- С.108-123.
6. Прудников В.В. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями /В.В. Прудников,**А.Н. Вакилов**, Е.Л. Филиканов // Вестник Омского университета - 2006. -Вып.3. - С.32-35.
7. Прудников В.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга / В.В. Прудников, П.В.Прудников, **А.Н.Вакилов**, А.С. Криницын // ЖЭТФ. - 2007.- Т. 132.- С. 417.-425
8. Прудников В.В. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями / В.В.Прудников,**А.Н. Вакилов** , Е.Л. Филиканов // Физика металлов и металловедение. - 2007.- Т. 104. -С. 563.-569.

9. Прудников В.В. Исследование неравновесной критической релаксации в трехмерной неупорядоченной модели Изинга. / П.В. Прудников, В.В. Прудников, **А.Н. Вакилов**, А.С. Криницын А.С. // Вестник Омского университета. - 2007.- Вып.3.- С.15-19.
10. Прудников В.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга / П.В. Прудников, В.В. Прудников, **А.Н. Вакилов**, А.С. Криницын // Вестник Омского университета.- 2007.- Вып.2.- С.41-45.
11. Прудников В.В. Исследование неравновесной критической релаксации в слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга / В.В. Прудников, П.В. Прудников, **А.Н. Вакилов**, В.Н. Бородихин, А.С.Криницын, А.А. Кролевец // Вестник Омского университета.- 2008.- Вып.3.- С.19-24.
12. Вакилов А.Н. Динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем / **А.Н.Вакилов**, Д.В.Талашок, А.О.Рашев // Вестник Омского университета.- 2009.- Вып.4.- С.114-119.
13. Prudnikov P.V. Short-time dynamics and critical behavior of the three-dimensional site-diluted Ising model/ P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, A.S. Krinitsyn, **A.N.Vakilov**, E.A.Pospelov, M.V. Rychkov //Physical Review E.- 2010.- V.81. -P. 011130-1 011130-11.
14. Прудников В.В. Численные исследования неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга с точечными дефектами / В.В.Прудников, П.В.Прудников, **А.Н.Вакилов**, Е.А.Поспелов, А.Ю.Питеримов, А.В.Чабров // Вестник Омского университета. - 2012.- Вып.2.- С. 101-105.
15. Прудников В.В. Динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем / В.В. Прудников, **А.Н.Вакилов**, Д.В.Талашок // Письма в ЖЭТФ. - 2014.- Т. 100.- № 9-10.- С. 760-765.
16. Prudnikov V.V. Monte Carlo renormalization group of dilute 3d Ising dynamics / V.V.Prudnikov, **A.N.Vakilov**, S.A.Zolotarev // Journal of Physics: Conference

Series.- 2014.- V. 510.- № 1.- P. 012019-01225.

(doi:10.1088/1742-6596/510/1/012019)

17. Prudnikov V.V. Influence of disorder on critical ageing in 3D Ising model/
V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, **A.N. Vakilov** // Physics Letters
A.- 2015.- V.379.- № 8.- P. 774-778.
18. Prudnikov V.V. Aging and non-equilibrium critical phenomena in Monte
Carlo simulations of 3D pure and diluted Ising models/ V.V. Prudnikov ,
P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, P.N. Malyarenko,
A.N. Vakilov // Progress of Theoretical and Experimental Physics.- 2015.-
V. 2015.- № 5. C. 053A01.
19. Vakilov A.N. Zeros of Partition Function and Critical Exponents of 3D Diluted
Ising Model/ **A.N. Vakilov** // Materials Science Forum. -2016- Vol. 845- P.
150-153. doi:10.4028/www.scientific.net/MSF.845.150
20. Vakilov A.N. Zeros in parttion function and critical behavior of disordered
three dimensional Ising model/ **A.N. Vakilov** // Journal of Siberian Federal
University. Mathematics and Physics. -2017.- V. 10.- № 1.- P. 128-131.

Монографии

21. Прудников В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного модели-
рования/ В.В. Прудников, **А.Н. Вакилов**, П.В. Прудников. –Москва: ФИЗ-
МАТЛИТ -2009, 224 с. (ISBN 978-5-9221-0961-1)
22. Прудников В.В. Теоретико-полевые и численные методы описания крити-
ческих явлений в структурно неупорядоченных системах/ В.В. Прудников,
А.Н. Вакилов, П.В. Прудников.- Омск: Изд-во ОмГУ-2012, 352 с. (ISBN 978-
5-7779-1451-9)
23. Вакилов А.Н. Суперкомпьютерные технологии в образовании и науке/
А.Н. Вакилов, П.В. Прудников, В.В. Прудников.- Омск: Изд-во ОмГУ- 2013,
360 с. (ISBN 978-5-9221-1556-8)
24. Прудников В.В. Теоретические методы описания неравновесного крити-
ческого поведения структурно неупорядоченных систем/ В.В. Прудни-

ков, П.В. Прудников, **А.Н. Вакилов** – Москва: ФИЗМАТЛИТ- 2013, 316 с. (ISBN 978-5-7779-1605-1)

25. Прудников В.В. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения и эффектов старения в структурно неупорядоченных системах/ В.В. Прудников, П.В. Прудников, **А.Н. Вакилов**, И.С. Попов. - Омск: Изд-во Омского ун-та- 2015, 370 с. (ISBN 978-5-7779-1886-4)

Полученные свидетельства о регистрации программы для ЭВМ

26. Свид. № 2011612758 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программная система расчета характеристик неравновесной критической динамики слабо неупорядоченной модели Изинга с применением параллельных методов / Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А., **Вакилов А.Н.**; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского (RU) дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 06.04.2011.
27. Свид. № 2013612582 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программа компьютерного моделирования процессов адсорбции на поверхности твердых тел и образования поверхностных наноструктур/ Прудников В.В., **Вакилов А.Н.**, Прудников П.В.; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 06.03.2013.
28. Свид. № 2071461354 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Комплекс моделирования неравновесных фазовых превращений в сильно неупорядоченных спиновых системах/ Прудников П.В., Прудников В.В., **Вакилов А.Н.**, Поспелов А.Н., Медведева М.А., Попов И.С.; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 28.03.2014.
29. Свид. № 2014618254 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программа моделирования дина-

мического критического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга методом численной ренормгруппы /Прудников В.В.,
Вакилов А.Н.; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им.Ф.М. Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 13.08.2014.

Публикации автора в сборниках трудов конференции

30. Вакилов А.Н. Динамика неоднородных систем при фазовых переходах и ее проявление в акустике /А.Н. Вакилов, В.В.Прудников // Сборник научных трудов Института гидродинамики СО РАН им. М.А.Лаврентьева «Акустика неоднородных сред» - В.100 - Новосибирск- 1991, С.186-191.
31. Вакилов А.Н. Критическая динамика неоднородной модели Изинга и ее проявление в акустике/ А.Н.Вакилов, О.Н.Марков, И.А.Прудникова, В.В.Прудников // Сборник научных трудов Института гидродинамики СО РАН им. М.А.Лаврентьева «Акустика неоднородных сред» -В.105-Новосибирск- 1992, С.81-88.
32. Vakilov A.N. Critical dynamics in three-dimensional and two-dimensional random Ising systems/V.V.Prudnikov, O.N.Markov, A.N. Vakilov // Abstracts of the Workshop "Phase transitions in dilute systemsBad Honnef -1995,p.23.
33. Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критического поведения антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных полей/А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, О.Н. Марков //Материалы ХХІХ международной зимней школы по теоретической физике "Коуровка - 2002 Екатеринбург -2002,с.135-136.
34. Вакилов А.Н. Определение критических параметров эффективного гамильтониана слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга /А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, В.Н.Бородихин//Материалы ХХІХ международной зимней школы по теоретической физике "Коуровка - 2002 Екатеринбург -2002,с.147-148.
35. Вакилов А.Н. Применение высокопроизводительного вычислительного кластера для моделирования критического поведения макроскопических систем/ А.Н.Вакилов, В.В.Прудников, П.В.Прудников, О.Н.Марков//Труды

X Всероссийской научно-методической конференции "Телематика'2003-Санкт-Петербург -2003, с.262-263.

36. Вакилов А.Н. Библиотека параллельных программ для моделирования критического поведения макроскопических неупорядоченных систем / А.Н.Вакилов, В.В.Прудников, Е.Л.Филиканов //Сборник материалов Второй Сибирской школы-семинара по параллельным вычислениям - Томск: Изд-во Том. ун-та -2004,с.26-31
37. Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга с учетом конечномерных эффектов /В.В.Прудников,А.Н.Вакилов, А.С.Криницын // Тезисы докладов VII Молодежного семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества -Екатеринбург ИФМ УрО РАН- 2006,С 39
38. Вакилов А.Н.Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга /А.Н.Вакилов, А.С.Криницын, В.В.Прудников,П.В.Прудников // Сб трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007,С. 46-47
39. Вакилов А.Н. Исследование неравновесной критической релаксации в трехмерной слабо неупорядоченной модели Изинга /А.Н.Вакилов, А.С.Криницын, В.В.Прудников, П.В.Прудников // Сб трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007, С.79-80
40. Вакилов А.Н. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями/А.Н.Вакилов,В.В.Прудников,Е.Л.Филиканов // Сб трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007,С. 87-88
41. Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных ферромагнетиков / В.В.Прудников

- , П.В.Прудников, А.Н.Вакилов, А.С.Креницын, М.В. Рычков // Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Выпуск 1. Вычислительная физика, Москва: Издательство КДУ -2009, с. 240-263.
42. Vakilov A.N. Monte Carlo renormalization group of dilute 3D Ising dynamics /A.N.Vakilov, V.V. Prudnikov, S.A.Zolotarev //Book of Abstracts XXV IUPAP Conference on Computational Physics -Moscow-2013, p.161
43. Вакилов А.Н. Коротковременная динамика возмущения начального состояния неупорядоченной модели Изинга / Д.В.Талашок, В.В. Прудников, А.Н. Вакилов // Тезисы докладов Международной конференции, посвящённой 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова. -Челябинск-2015,с.113
44. Вакилов А.Н. Нули статистической суммы и критические свойства неупорядоченной модели Изинга /А.Н. Вакилов, В.В.Дудник,Д.В.Талашок //Тезисы докладов Международной конференции, посвящённой 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова.-Челябинск-2015-с.93
45. Vakilov A.N.Zeros in partition function and critical behavior of disordered three dimensional Ising model/A.N. Vakilov // Book of Abstracts VI Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism»-Krasnoyarsk-2016,p.97

Список литературы

- [1] Изюмов Ю.А. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. / Ю.А. Изюмов, В.Н.Сыромятников - Москва:Наука -1984, 248 с.
- [2] Вильсон К..Ренормализационная группа и ε -разложение./К.Вильсон Кл., Д.Когут - Москва: Мир -1975, 256 с. УФН. - 1985. - Т. 146. -№ 3.- С. 459–491.
- [3] De Dominicis C. Field-theory renormalization and critical dynamics above T_c : Helium, antiferromagnets, and liquid-gas systems /C.De Dominicis,L.Peliti// Phys. Rev. B.- 1978.- V. 18.- P. 353–376.
- [4] Di Castro C. The multiplicative renormalization group and the critical behavior in $d = 4 - \varepsilon$ dimensions/C.Di Castro // Lett. nuovo cim.- 1972. - V. 5.- № 1.- P. 69–74.
- [5] Di Castro C. Renormalization group approach to critical phenomena. Phase transition and critical phenomena, ed. Domb C. and Lebowitz J.L./C.Di Castro, G.Jona-Lasinio - New York: Acad. press.,- 1976.- V. 6.- P. 508–558.
- [6] Fisher M.E. The theory of equilibrium critical phenomena./M.E.Fisher //Rep. Progr. Phys. -1967.- V. 30.- P. 615–730.
- [7] Le Guillou J.C. Critical exponents for the n-vector model in three dimensions from field theory/ J.C.Le Guillou, J.Zinn-Justin // Phys.Rev. Lett.- 1977.- V. 39.- № 2.- P. 95–98.
- [8] Le Guillou J.C. Critical exponents from field theory/J.C.Le Guillou,J.Zinn-Justin // Phys. Rev. B. -1980.- V. 21.- № 7.- P. 3976–3998.
- [9] Li Z.B. Dynamic Monte Carlo measurement of critical exponents/Z.B.Li, L.Schülke, B.Zheng // Phys. Rev. Lett.- 1995.- V. 74.- № 25.- P. 3396–3398.
- [10] Li Z.B. Finite size scaling and critical exponents in critical relaxation/Z.B.Li, L.Schülke, B.Zheng // Phys. Rev. E. -1996.- V. 53.- № 5. - P. 2940–2951.
- [11] Linke A. Large-scale simulation of the two-dimensional kinetic Ising model/A.Linke,D.W.Heermann,P.Altevogt,M.Siegert // Physica A. -1995.- V. 225.- P. 318–324.

- [12] Parisi G. Field-theoretic approach to second-order phase transitions in two- and three-dimensional systems/G.Parisi// J. Stat. Phys.- 1980.- V. 23.- P. 49–82.
- [13] Halperin B.I. Renormalization-group methods for critical dynamics/ B.I.Halperin, P.C. Hohenberg, Ma S. // Phys. Rev. B.- 1974.- V. 10.- № 1.- P. 139–153.
- [14] Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models /A.B. Harris// J. Phys. C.- 1974. -V. 7. -№ 6. -P. 1671–1692.
- [15] Хмельницкий Д.Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах/Д.Е.Хмельницкий // ЖЭТФ. - 1975.- Т. 68.- № 5.- С. 1960–1968.
- [16] Murtazaev A.K. Critical properties of the three-dimensional Ising model with quenched disorder/A.K.Murtazaev,A.B.Babaev// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. -2009. -V.321.- N 17.- С. 2630-2635.
- [17] Муртазаев А.К. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с замороженным беспорядком на кубической решетке /А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б.Бабаев// ЖЭТФ. - 2004.- Т. 126.- С.1377.
- [18] Фольк Р. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга / Р.Фольк , Ю.Головач, Т. Яворский// УФН. 2003.- Т. 173- № 2.- С. 175–200.
- [19] Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком/В.С.Доценко // УФН.- 1995.- Т. 165.- № 5.- С. 481–528.
- [20] Соколов А.И. О критическом поведении модели Изинга с примесями/А.И.Соколов,В.Н.Шалаев // ФТТ.- 1981.- Т. 23.- № 7.- С. 2058–2063.
- [21] Sokolov A.I.Critical exponents for the model with unique stable fixed point from three-loop RG expansions/A.I.Sokolov,K.B.Varnashev,A.I.Mudrov // Int. J. Mod. Phys. B.- 1998.- V. 12.- № 12–13. -P. 1365–1377.
- [22] Aharony A. Critical phenomena in disordered systems/A.Aharony // J. Magn. Magn. Mater. - 1978. -V. 7.- № 1.- P. 198–206.

- [23] Aharony A. Crossover from random exchange to random field critical behaviour/A.Aharony // *Europhys. Lett.*- 1986.- V. 1.- № 12.- P. 617–621.
- [24] Andelman D. Metastability in the random-field Ising model /D.Andelman,J.F.Joanny// *Phys. Rev. B.* - 1985. - V. 32.- № 7. - P. 4818–4821.
- [25] Andreichenko V.B. Dynamics in a dilute ferromagnet at the percolation threshold /V.B.Andreichenko,W.Selke,A.L.Talapov// *J. Phys. A.* - 1992. - V. 25. - P. L283–L286.
- [26] Markov O.N. Monte Carlo renormalization group of dilute 2D Ising dynamics/O.N.Markov, V.V.Prudnikov // *Europhysics Letters.* - 1995.- V. 29. - № 3. - P. 245–250.
- [27] Prudnikov V.V. Critical dynamics of disordered two-dimensional Ising systems: a Monte Carlo study/V.V.Prudnikov,O.N.Markov // *J. Physics A: Math. Gen.*- 1995. - V. 28.- P. 1549–1556.
- [28] Prudnikov V.V. Stability of critical behavior of weakly disordered systems with respect to the replica symmetry breaking /V.V.Prudnikov , P.V.Prudnikov, A.A.Fedorenko// *Physical Review B.* - 2001. - V. 63.- № 18. 184201.- P. 1–6.
- [29] Prudnikov V.V. Monte Carlo studies of critical behaviour of systems with long-range correlated disorder/V.V.Prudnikov, P.V.Prudnikov, S.V.Dorofeev, V.Y.Kolesnikov // *Condensed Matter Physics.*- 2005.- V. 8.- № 1.- P. 213–224.
- [30] Borodikhin V.N. Study of a disordered antiferromagnetic Ising model with random fields /V.N.Borodikhin, V.V.Prudnikov // *The Physics of Metals and Metallography.*- 2005.- V. 99. Suppl. 1. - P. 24–27.
- [31] Marro F. Critical behaviour of Ising models with static site dilution /F.Marro F., A.Labarta, F.Tejada // *Phys. Rev. B.* -1986. -V. 34. -№ 1.- P. 347–349.
- [32] Mayer I.O. Critical exponents of the dilute Ising model from four-loop expansion /I.O.Mayer// *J. Phys. A.* - 1989. - V. 22.- P. 2815–2823.

- [33] Mayer I.O., Sokolov A.I., Shalaev B.N. Critical exponents for cubic and impure uniaxial crystals: most accurate theoretical values /I.O.Mayer, A.I.Sokolov, B.N.Shalaev// *Ferroelectrics*. 1989.- V. 95. - № 1. - P. 93–96.
- [34] Newman K.E. Cubic N-vector model and randomly dilute Ising model in general dimensions /K.E.Newman, E.K.Riedel// *Phys. Rev. B*. - 1982.- V. 25.- № 1. - P. 264–280.
- [35] Ogielski A.T. Critical behavior of the three-dimensional dilute Ising antiferromagnet in a field/A,T.Ogielski, D.A.Huse // *Phys. Rev. Lett.*- 1986.- V. 56. -№ 12. -P. 1298–1301.
- [36] Grinstein G. Application of the renormalization group to phase transition in disordered systems /G.Grinstein, A.Luther // *Phys. Rev. B*. -1976.- V. 13. - № 3. - P. 1329–1343.
- [37] Harris C.K. Critical dynamics of diluted Ising systems /C.K.Harris, R.B.Stinchcombe// *Phys. Rev. Lett.* - 1986.- V. 56.- № 8.- P. 869–872.
- [38] Heuer H.-O. Monte Carlo simulation of strongly disordered Ising ferromagnets /H.-O.Heuer // *Europhys. Lett.* - 1990.- V. 12.- № 6.- P. 551–556.
- [39] Heuer H.-O. Monte Carlo simulation of strongly disordered Ising ferromagnets /H.-O.Heuer // *Phys. Rev. B*. -1990.- V. 42.- № 10. - P. 6476–6484.
- [40] Heuer H-O. Critical slowing down in local dynamics simulations /H.-O.Heuer// *J.Phys. A*. - 1992. - V. 25.- № 9. - P. L567–L573.
- [41] Folk R., Holovatch Yu., Yavors’kii T.The correction-to-scaling exponent in dilute systems /R.Folk, Yu.Holovatch, T.Yavors’kii // *Pis’ma v ZETF*. - 1999. - V. 69. - № 10. - P. 698–702.
- [42] Boyanovsky D. Critical behavior of m-component magnets with correlated impurities/D.Boyanovsky, J.L.Cardý J.L.// *Phys. Rev. B*. - 1982.- V. 26.- № 1.- P. 154–170.
- [43] Afzal N. Aging processes in systems with anomalous slow dynamics/N.Afzal, M. Pleimig // *Phys. Rev. E* -2013.- V.57 - P.012114.

- [44] Berthier L. Non-equilibrium glass transitions in driven and active matter / L. Berthier, J. Kurchan // Nature Phys. - 2013-V.9. - P.310-324.
- [45] Calabrese P. Aging properties of critical systems / P. Calabrese, A. Cambassi // J. Phys. A. -2005. -V. 38.- P. R133.
- [46] Kim J.K. Numerical Computation of Finite Size Scaling Functions: An Alternative Approach to Finite Size Scaling / J.K. Kim, A.J. de Souza, D.P. Landau // Phys. Rev. E.- 1996.- V. 54.- P. 2291.
- [47] Jan N. Dynamic Monte Carlo renormalization group / N. Jan, L.L. Moseley, D. Stauffer // J. Stat. Phys. - 1983.- V. 33.- № 1 - P. 1-11.
- [48] Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов / Л.Д. Ландау // ЖЭТФ.- 1937.- Т. 7.- № 1.- С. 19.
- [49] Ландау Л.Д. Статистическая физика. 3-е изд. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц - Москва: Наука,- 1976, 584 с.
- [50] Onsager L. A two-dimensional model with an order-disorder transition. / L. Onsager // Phys. Rev. -1944.- V.65.- № 1.- P. 117–149.
- [51] Паташинский А.З. Гипотеза подобия в теории фазовых переходов второго рода / А.З. Паташинский // ЖЭТФ.- 1967.- Т. 53.- № 6.- С. 1987–1996.
- [52] Паташинский А.З. О поведении упорядочивающихся систем вблизи точки фазового перехода / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский // ЖЭТФ.- 1966. -Т. 50.- № 2.- С. 439–447.
- [53] Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский - Москва: Наука,- 1982, 383 с.
- [54] Widom B. Equation of state in the neighbourhood of the critical point / B. Widom // J. Chem. Phys. -1965.- V. 43.- № 11.- P. 3898–3916.
- [55] Каданов Л.П. Критические явления, гипотеза универсальности, скейлинг и капельная модель. Квантовая теория поля и физика фазовых переходов. / Л.П. Каданов - Москва: Мир, 1975. С. 7–32.

- [56] Kadanoff L.P. Scaling laws for Izing models near T_c /L.P.Kadanoff // Physics.- 1966.- V. 2.- № 6.- P. 263–273.
- [57] Wilson K.G. Renormalization Group and Critical Phenomena/K.G.Wilson // Phys. Rev. B.- 1971.- V. 4. - P. 3174-3184.
- [58] Wilson K.G.Feynmann-graph expansion for critical exponents /K.G.Wilson// Phys. Rev. Lett.- 1972.- V. 28.- № 9.- P. 548–551.
- [59] Wilson K.G.Critical exponent in 3.99 dimensions/K.G.Wilson,M.E. Fisher // Phys. Rev. Lett.- 1972.-V. 28.- № 4. -P. 240–241.
- [60] Amit D.Field theory the renormalization group and critical phenomena./D.Amit - New York: Acad.press.: McGraw-Hill, - 1978,333 p.
- [61] Bresin E. Field theoretical approach to critical phenomena/E.Bresin, J.C.Le Guillou, J.Zinn-Justin // Phase transition and critical phenomena, ed. Domb C. and Lebowitz J.L. New York: Acad. press.- 1976. - V. 6. - P. 127–249.
- [62] Baker G.A.Critical indices from perturbation analysis of the Callan-Symanzik equation/G.A. Baker,B.G. Nickel ,D.I.Meiron // Phys. Rev. B. -1978.- V. 17.- № 3.- P. 1365–1374.
- [63] Baker G.A. Ising-model critical indices in three dimensions from the Callan-Symanzik equation/G.A. Baker,B.G. Nickel ,D.I.Meiron,M.S.Green // Phys. Rev. Lett.- 1976.- V. 36.- № 23.- P. 1351–1354.
- [64] Ма Ш.Современная теория критических явлений./Ш.Ма -Москва: Мир, -1980, 298 с.
- [65] Изюмов Ю.А.Статистическая механика магнитоупорядоченных систем./Ю.А.Изюмов,Ю.Н.Скрябин - М.: Наука, -1987,260 с.
- [66] Stauffer D. Violation of dynamical scaling for randomly dilute Ising ferromagnets near percolation threshold/D.Stauffer // Phys. Rev. Lett.- 1975.- - V. 35.- № 6.- P. 394–397.
- [67] Stauffer D.Scaling theory of percolation clusters /D.Stauffer// Physics Reports.- 1979.- V. 54.- № 1.- P. 1–78.

- [68] Stauffer D. Coarse graining, Monte Carlo renormalisation, percolation threshold and critical temperature in the Ising model/D.Stauffer // J. Phys. A.- 1984.- V. 17.- P. L925–928.
- [69] Stauffer D.Introduction to percolation theory./D.Stauffer – Taylor & Fransis, 1985, 294 p.
- [70] Stinchcombe R.B. Dilute magnetism./R.B.Stinchcombe //Phase transitions and critical phenomena, ed. Domb C. and Lebowitz J.L. New York: Acad. press. -1983.- V. 7.- P. 151–191.
- [71] Fisher M.E. Renormalization of critical exponent by hidden variables /M.E.Fisher// Phys. Rev.- 1968.- V. 176.- № 1.- P. 257–272.
- [72] Lubensky T.C. Critical properties of random-spin models from of the ε expansion /T.C.Lubensky // Phys. Rev. B.- 1975.- V. 11.- № 9.- P. 3573-3580.
- [73] Дороговцев С.Н.Критические свойства магнетиков с дислокациями и точечными примесями /С.Н.Дороговцев // ЖЭТФ.- 1981.- Т. 80.- № 5- С. 2053 - 2067.
- [74] Prudnikov P.V.Critical behaviour of weakly disordered systems with replica symmetry breaking potentials /P.V.Prudnikov,V.V. Prudnikov //J. Phys. Studies.- 2001.- V. 5.- № 3/4.- P. 285–292.
- [75] Weinrib A. Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder/A.Weinrib, B.I.Halperin // Phys. Rev. B.- 1983.- V. 27.- P. 413–427.
- [76] Birgeneau R.J. Critical behaviour of site-diluted three dimensional Ising magnet /R.I.Birgeneau ,R.A. Cowley, G.Shirane, H.Yoshizawa,D.P.Belanger ,A.R.King,V. Jaccarino// Phys. Rev. B. -1983- V. 27.- № 12.- P. 6747–6757.
- [77] Thurston T.R. Critical behaviour of site-diluted three dimensional Ising magnet/T.R.Thurston,C.J. Peter ,R.J.Birgeneau ,P.M. Horn // Phys. Rev. B. -1988.- V. 37.- P. 9559–9563.

- [78] Gugliandolo L.F. Off equilibrium dynamics and aging in unfrustrated systems/L.F.Gugliandolo,J.Kurchan,G.Parisi //J.Phys.I(France) - 1994 - V.4. - P.1641
- [79] Codreshe C.Nonequilibriumc crytical dynamics of ferromagnetic spin systems/C.Codreshe, J.M.Luck //J.Phys.Condens. Matter.-2002-V.14-P.1589
- [80] Mayer P. Fluctuation dissipation relation in the non-equilibrium critical dynamics of Ising models./P.Mayer,L.Berthier,J.P.Garrahan, P.Sollich //Phys.Rev.E. - 2003 - V.68 - P.016116
- [81] Chatelain C. A far-from-equilibrium fluctuation-dissipation relation for an Ising-Glauber-like model./C.Chatelain// J.Phys.A:Math.Gen. - 2003 - V.36 - P.10739
- [82] Lippiello E. Fluctuation dissipation ratio in the one dimensional kinetic Ising model./E.Lippiello,M.Zannetti //Phys.Rev.E. - 2000 - V.61 -P.3369
- [83] Abriet S.Off equilibrium dynamics in the 3d-XY system. /S.Abriet, D.Karevski//Eur.Phys.J.B. - 2004 - V.41 - P.79
- [84] Codreshe C.Response of non-equilibrium systems of criticality ferromagnetic models /C.Codreshe,J.M.Luck //J.Phys.A:Math.Gen.-2000-V.33-P.9141
- [85] Janssen H.K. New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes/H.K.Janssen, B.Schaub, B.Schmittmann// Z. Phys. B. - 1989.- V. 73. -P. 539.
- [86] Hohenberg P.C.Theory of dynamic critical phenomena/ P.C.Hohenberg, B.I.Halperin // Rev. Mod. Phys. - 1977.- V. 49.- P. 435–479.
- [87] Janssen H.K. On the crossover to universal criticality in dilute Ising systems/H.K.Janssen ,K.Oerding, E.Sengespeick // J.Phys. A.- 1995. V. 28.- № 21. - P. 6073–6085.
- [88] Swendsen R.H. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulation/ R.H.Swendsen, J.-S. Wang //Phys.Rev.Lett. - 1987.-V.58. - P.86.-88.
- [89] Wolf U. Collective Monte Carlo updating for spin systems/U.Wolf // Phys. Rev. Lett.- 1989.- V. 62.- P. 361.

- [90] Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике: В 2 ч./Х.Гулд, Я.Тобочник - Москва: Мир, 1992. Ч. 2.,400 с.
- [91] Oerding K.The dynamic critical exponent of dilute and pure Ising systems/K.Oerding // J. Phys. A.- 1995.- V. 28.- P. L639–L643.
- [92] Oerding K. Non-equilibrium critical relaxation with reversible mode coupling/K.Oerding,H.K.Janssen //J.Phys.A:Math.Gen. -1993 -V.26.-P.5295
- [93] Calabrese P.Aging in ferromagnetic systems at critically near four dimensions./P.Calabrese,A.Gambassi //Phys.Rev.E. -2002- V.66 - P.066101
- [94] Prudnikov P.V. Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with long-range correlated disorder/P.V.Prudnikov,V.V. Prudnikov,B.Zheng,S.V.Dorofeev ,V.Y. Kolesnikov// Progress of Theoretical Physics. — 2007. — V. 117, No. 6. — P. 973–991.
- [95] Calabrese P.Two-loop critical fluctuation-dissipation ratio for the relaxtional dynamics of the $O(N)$ Landau-Ginzburg Hamiltonian/P.Calabrese,A.Gambassi //Phys.Rev.B. - 2002 - V.66- P212407
- [96] Prudnikov V.V.Stability of critical behaviour of weakly disordered systems to introduction of potentials with replica symmetry breaking /V.V.Prudnikov,P.V.Prudnikov,A.A. Fedorenko// J. Physics A: Math. Gen. - 2001.- V. 34.- № 12.- P. L145–L152.
- [97] Calabrese P. Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state./P.Calabrese,A.Gambassi,F.Krzakala // J.Stat.Mech. - 2006 - V.6 -P.2
- [98] Calabrese P. Three-dimensional randomly dilute Ising model:Monte-Carlo results/P.Calabrese,V. Martin-Mayor,A. Pelissetto ,E.Vicari //Phys. Rev. E.- 2003.- V. 68.- P. 036136.
- [99] Прудников В.В. Определение критических параметров эффективно-го гамильтониана слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга/В.В.Прудников,А.Н.Вакилов, В.Н.Бородихин // Математические структуры и моделирование.- 2001.- Вып.8.- с.56-65.

- [100] Прудников В.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга/ В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Вакилов, В.Н.Бородихин // Математические структуры и моделирование.- 2003.- Вып.11.- с.108-123.
- [101] Прудников П.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга /П.В. Прудников, В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницын // Вестник Омского университета.- 2007.- Вып.2.- с.41-45.
- [102] Прудников В.В. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга/В.В.Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С.Криницын // ЖЭТФ. - 2007.- Т. 132.- С. 417-425.
- [103] Прудников В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования/В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, П.В.Прудников. –Москва: ФИЗМАТЛИТ -2009, 224 с.
- [104] Прудников В.В. Теоретико-полевые и численные методы описания критических явлений в структурно неупорядоченных системах/В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, П.В.Прудников.-Омск: Изд-во ОмГУ-2012, 352 с.
- [105] Вакилов А.Н. Суперкомпьютерные технологии в образовании и науке/А.Н.Вакилов, П.В.Прудников, В.В.Прудников.- Омск: Изд-во ОмГУ-2013, 360 с.
- [106] Вакилов А.Н. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем/ В.В. Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Вакилов – Москва: ФИЗМАТЛИТ- 2013,316 с.
- [107] Прудников В.В. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения и эффектов старения в структурно неупорядоченных системах/ В.В. Прудников, П.В.Прудников, А.Н. Вакилов, И.С.Попов - Омск: Изд-во Омского ун-та- 2015,370 с.
- [108] Vakilov A.N. Zeros of Partition Function and Critical Exponents of 3D Diluted Ising Model/ A.N.Vakilov //Materials Science Forum. -2016- Vol. 845- P. 150-153.

- [109] Vakilov A.N. Zeros in partition function and critical behavior of disordered three dimensional Ising model/A.N. Vakilov //Journal of Siberian Federal University. Mathematics and Physics. -2017.- V. 10.- № 1.- P. 128-131.
- [110] Вакилов А.Н. Определение критических параметров эффективного гамильтониана слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга /А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, В.Н.Бородихин//Материалы ХХІХ международной зимней школы по теоретической физике "Коуровка - 2002 Екатеринбург -2002,с.147-148.
- [111] Вакилов А.Н. Применение высокопроизводительного вычислительного кластера для моделирования критического поведения макроскопических систем/ А.Н.Вакилов, В.В.Прудников, П.В.Прудников, О.Н.Марков//Труды X Всероссийской научно-методической конференции "Телематика'2003 Санкт-Петербург -2003, с.262-263.
- [112] Вакилов А.Н. Библиотека параллельных программ для моделирования критического поведения макроскопических неупорядоченных систем / А.Н.Вакилов, В.В.Прудников, Е.Л.Филиканов //Сборник материалов Второй Сибирской школы-семинара по параллельным вычислениям - Томск: Изд-во Том. ун-та -2004,с.26-31
- [113] Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга с учетом конечномерных эффектов /В.В.Прудников,А.Н.Вакилов, А.С.Креницын // Тезисы докладов VII Молодежного семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества -Екатеринбург ИФМ УрО РАН- 2006,С 39
- [114] Вакилов А.Н.Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга /А.Н.Вакилов, А.С.Креницын, В.В.Прудников,П.В.Прудников // Сб трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007,С. 46-47
- [115] Вакилов А.Н. Нули статистической суммы и критические свойства неупорядоченной модели Изинга /А.Н. Вакилов, В.В.Дудник,Д.В.Талашок //-

Тезисы докладов Международной конференции, посвящённой 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова.-Челябинск-2015-с.93

- [116] Vakilov A.N.Zeros in parttion funcction and critical behavior of disordered three dimensional Ising model/A.N. Vakilov // Book of Abstracts VI Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism»-Krasnoyarsk-2016,p.97
- [117] Свид. № 2013612582 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программа компьютерного моделирования процессов адсорбции на поверхности твердых тел и образования поверхностных наноструктур/ Прудников В.В., **Вакилов А.Н.**, Прудников П.В.; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им.Ф.М.Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 06.03.2013.
- [118] Hennecke M. Critical Dynamics of Cluster Algorithms in the Dilute Ising Model/M. Hennecke, U.Heyken // J. Stat. Phys.- 1993.- V. 72. -P. 829.
- [119] Ivaneyko D.Criticality of the random-site Ising model: Metropolis, Swendsen-Wang and Wolff Monte Carlo algorithms/D.Ivaneyko, J.Ilnytskyi, B.Berche et al. // Condens. Matter Phys.- 2005.- V. 8. - P. 149.
- [120] Wegner F.J. Corrections to Scaling Laws/F.J.Wegner // Phys. Rev. B. — 1972. — V. 5. — P. 4529.
- [121] Pelissetto A. Randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study /A. Pelissetto,E.Vicari// Phys. Rev. B.- 2000.- V. 62.- P. 6393.
- [122] Heuer H.-O.Dynamic scaling of disordered Ising systems/H.-O.Heuer // J. Phys. A.- 1993. -V. 26.- № 6.- P. L341–L346.
- [123] Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков /В.В.Прудников, А.Н.Вакилов // ЖЭТФ.- 1993.- -Т. 103.- № 3.- С. 962–969.
- [124] Ballesteros H.G.Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model/H.G.Ballesteros,L.A.Fernandez,V. Martin-Mayor,M.Sudupe // Phys. Rev. B. — 1998. — V. 58, No. 5. — P. 2740–2747.

- [125] Belanger D.P. Critical dynamics of site-diluted three dimensional Ising magnet/D.P.Belanger,R.I. Birgeneau, G.Shirane,H.Yoshizawa, A.R.King,V. Jaccarino// J. de Physique Collque C8. -1988.- V. 49.- № 7.- P. 1229–1238.
- [126] Slanic Z. Equilibrium random-field Ising critical scattering in antiferromagnet $Fe_{0.93}Zn_{0.07}F_2$ / Phys.Rev.Lett. - 1989. - V.82. - P.426 - 433.
- [127] Belanger D.P.Crossover from random-exchange to random-field critical behavior in $Fe_xZn_{1-x}F_2$ /D.P.Belanger,A.R.King,V.Jaccarino// Phys. Rev. B. -1986.- V. 34.- P. 452.
- [128] Mitchell P.W.Critical behavior of the three-dimensional site-random Ising magnet: $Mn_xZn_{1-x}F_2$ /P.W.Mitchell,R.A. Cowely ,H. Yoshizawa ,P.Boni,Y.J.Uemura // Phys. Rev. B. — 1986. — V. 34. — P. 4719.
- [129] Wang F. Study on dynamical critical exponents of the Ising model using the damage spreading method /F.Wang, N.Hatane,M.Suzuki // J. Phys. A.-1995.- V. 28.- № 16.- P. 4543–4552.
- [130] Wiseman S. Self-averaging, distribution of pseudo-critical temperatures and finite size scaling in critical disordered systems/S.Wiseman ,E.Domany// Phys. Rev. Lett. — 1998. — V. 81. — P. 22; Phys. Rev. E. — 1998. — V. 58. — P. 2938.
- [131] Yang C.N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation /C. N.Yang, T.D.Lee//Phys. Rev.-1952- V.87.- P.404.
- [132] Yang C.N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model/C. N.Yang, T.D.Lee// Phys. Rev. -1952- V.87- P.410.
- [133] Fisher M.E. The nature of critical points/M.E.Fisher //Lectures in Theoretical Physics, edited by W.E. Brittin University of Colorado Press, Boulder, CO, - 1965.- V. 7C.- P. 1.
- [134] Ferrenberg R.H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions/R.H.Ferrenberg, R.H.Swendsen//Phys. Rev. Lett. -1988. - V.61.- P.2635-2638.

- [135] Gordillo-Guerrero A. Universal amplitude ratios in the Ising model in three dimensions / A. Gordillo-Guerrero, R. Kenna, J. J. Ruiz-Lorenzo // *J. Stat. Mech.* - 2011 - P0919 P.1-16.
- [136] Belanger D.P., Young A.P. The random field Ising model // *J. Magn. Magn. Mater.* - 1991. - V. 100. - № 2. - P. 272–291.
- [137] Newman M.E.J., Barkema G.T. Monte Carlo study of the random-field Ising model / M.E.J. Newman, G.T. Barkema // *Phys. Rev. E.* - 1996. - V. 53. - № 2. - P. 393–404.
- [138] Grest G.S. Comparative Monte Carlo and mean-field studies of random-field Ising systems / G.S. Grest, C.M. Soukoulis, K. Levin // *Phys. Rev. B.* - 1986. - V. 33. - № 11. - P. 7659–7674.
- [139] Прудников В.В. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, Е.Л. Филиканов // *Физика металлов и металловедение.* - 2007. - Т. 104. - С. 563.-569.
- [140] Прудников В.В. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, Е.Л. Филиканов // *Вестник Омского университета.* - 2006. - № 3. - С. 32-35.
- [141] Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критического поведения антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных полей / А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, О.Н. Марков // *Материалы XXIX международной зимней школы по теоретической физике "Коуровка - 2002 Екатеринбург - 2002,* с.135-136.
- [142] Вакилов А.Н. Исследование методом параллельных температур низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями / А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, Е.Л. Филиканов // *Сб. трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007,* С. 87-88

- [143] Moreno J.J. Finding low-temperature states with parallel tempering, simulated annealing and simple Monte Carlo / J.J. Moreno, H.G. Katzgraber, A.K. Hartmann // *Int. J. Mod. Phys. C*. - 2003 - V. 14 - P. 285-312
- [144] Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния / В.С. Доценко // УФН. - 1993. - Т. 163. - № 6 - С. 1-37.
- [145] Прудников В.В. Исследование неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных магнитных полей методом Монте-Карло / В.В. Прудников, В.Н. Бородихин // *ЖЭТФ*. - 2005. - Т. 128. - № 2 - С. 337-343.
- [146] Бородихин В.Н. Исследование неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга с эффектами случайных магнитных полей / Бородихин В.Н., Д.В. Дмитриев, В.В. Прудников // *Известия вузов. Физика*. - 2004. - № 5. - С. 58-62.
- [147] Kofke D.A. On the acceptance probability of replica-exchange Monte Carlo trials / D.A. Kofke // *J. Chem. Phys.* — 2002. — V. 117. — P. 6911; Erratum. — *J. Chem. Phys.* — 2004. — V. 120. — P. 10852.
- [148] Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков / А.Н. Вакилов, В.В. Прудников // *Письма в ЖЭТФ*. - 1992. - Т. 55. - № 12. С. 709-712.
- [149] Prudnikov V.V. Monte Carlo renormalization group of dilute 3d Ising dynamics / V.V. Prudnikov, A.N. Vakilov, S.A. Zolotarev // *Journal of Physics: Conference Series*. - 2014. - Т. 510. - № 1. - P. 012019-01225.
- [150] Vakilov A.N. Monte Carlo renormalization group of dilute 3D Ising dynamics / A.N. Vakilov, V.V. Prudnikov, S.A. Zolotarev // *Book of Abstracts XXV IUPAP Conference on Computational Physics - Moscow-2013*, p.161
- [151] Vakilov A.N. Critical dynamics in three-dimensional and two-dimensional random Ising systems / V.V. Prudnikov, O.N. Markov, A.N. Vakilov // *Abstracts of the Workshop "Phase transitions in dilute systems Bad Honnef - 1995"*, p.23.

- [152] Свид. № 2014618254 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программа моделирования динамического критического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга методом численной ренормгруппы /Прудников В.В., **Вакилов А.Н.**; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им.Ф.М.Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 13.08.2014.
- [153] Kalle C.Vectorised dynamics Monte Carlo renormalisation group for the Ising model/C.Kalle // J.Phys. A.- 1984.- V. 17.- № 14.- P. L801–L806.
- [154] Wang J.S., Chowdhury D. The critical behaviour of three-dimensional dilute Ising model: universality and the Harris criterion/J.S.Wang,D.Chowdhury // J. Phys.(Paris). -1989.- V. 50.- № 19.- P. 2905–2910.
- [155] Прудников В.В. Критическая динамика разбавленных магнетиков /В.В.Прудников, А.Н.Вакилов // ЖЭТФ - 1992 - Т. 101.- № 6.- С. 1853–1861.
- [156] Вакилов А.Н. Динамика неоднородных систем при фазовых переходах и ее проявление в акустике /А.Н. Вакилов, В.В.Прудников // Сборник научных трудов Института гидродинамики СО РАН им. М.А.Лаврентьева "Акустика неоднородных средвып.100- Новосибирск- 1991, с.186-191.
- [157] Вакилов А.Н. Критическая динамика неоднородной модели Изинга и ее проявление в акустике/А.Н. Вакилов, О.Н.Марков,И.А.Прудникова,В.В.Прудников // Сборник научных трудов Института гидродинамики СО РАН им. М.А.Лаврентьева "Акустика неоднородных средвып.105- Новосибирск- 1992, с.81-88.
- [158] Иванов А.В.Критическая динамика спиновых систем в четырехпетлевом приближении/А.В.Иванов,В.В.Прудников,А.А.Федоренко// Письма в ЖЭТФ.- 1997.- Т. 66.- № 12.- С. 793–798.
- [159] Белим С.В. Критическая динамика неупорядоченных магнетиков в трехпетлевом приближении /С.В.Белим, Е.В.Осинцев, В.В.Прудников, А.А.Федоренко// Физика твердого тела. -1998.- Т. 40.- № 8.- С. 1526–1531.

- [160] Белим С.В. Критическая динамика слабо неупорядоченных спиновых систем / С.В.Белим, А.В.Иванов, Е.В.Осинцев, В.В.Прудников, А.А.Федоренко // ЖЭТФ. -1998.- Т. 114.- № 3.- С. 972–984.
- [161] Криницын А.С. Расчет динамического критического индекса методом суммирования асимптотических рядов / А.С.Криницын, В.В.Прудников, П.В.Прудников // Теоретическая и математическая физика. -2006.- Т. 147.- № 1 - С. 137–154.
- [162] Prudnikov V.V. Static and dynamic critical properties of 3D systems with long-range correlated quenched defects / V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko // J. Physics A: Math. Gen.- 1999.- V. 32.- № 49.- P. 8587 - 8600.
- [163] Prudnikov V.V. Critical behaviour of 3D systems with long-range correlated quenched defects / V.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko // J. Physics A: Math. Gen.- 1999. -V. 32.- № 36.- P. L399–L405.
- [164] Prudnikov V.V. Field-theory approach to critical behavior of systems with long-range correlated defects / V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko // Physical Review B. - 2000.- V. 62.- № 13.- P. 8777–8786.
- [165] Lawrie I.D. Static and dynamic properties of systems with extended defects: two-loop approximation / I.D. Lawrie, V.V. Prudnikov // J. Physics C: Solid State. -1984.- V. 17. -P. 1655–1668.
- [166] Jayaprakash C. Higher-order corrections to the ϵ - expansions of the critical behaviour of the random Ising system / C. Jayaprakash, H.J. Katz // Phys. Rev. B.- 1977.- V. 16.- № 9.- P. 3987–3990.
- [167] Jug G. Critical behaviour of disordered spin systems in two and three dimensions / G. Jug // Phys. Rev. B.- 1983.- V. 27.- № 1.- P. 607–612.
- [168] De Dominicis C. Field-theoretic techniques and critical. I. Ginzburg-Landau stochastic models without energy conservation / C. De Dominicis, E. Brezin, J. Zinn-Justin // Phys. Rev. B. - 1975. - V. 12.- № 11 - P. 4945–4952.
- [169] Боголюбов Н.Н. Введение в теорию квантованных полей / Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков — Москва:Наука -1984, 540 с.

- [170] Grinstein G. Dynamics of spin interacting with quenched random impurities /G.Grinstein,S.K.Ma, G.F.Mazenko// Phys. Rev. B.- 1977.- V. 15. - № 1. - P. 258–272.
- [171] Krey U. On the critical dynamics on disordered spin systems/U.Krey // Z. Phys. B. -1977. -V. 26.- № 2.- P. 355–366
- [172] Bausch R. Critical dynamics of an interface in $1 + \varepsilon$ dimensions/ R.Bausch, V.Dohm,H.K., Janssen, R.K.Zia // Phys.Rev.Lett. - 1981. -V. 47.- № 25.- P. 1837–1840.
- [173] Dotsenko V.S. Critical behaviour of the 2D-Ising model with impurity bonds/V.S.Dotsenko,V.S.Dotsenko // J. Phys. C.- 1982.- V. 15.- № 3.- P. 495–507.
- [174] Jug G. Critical singularities of the random two-dimensional Ising model/G.Jug // Phys. Rev. B. -1983.- V. 27. -№ 7.- P. 4518–4521.
- [175] Williams J.K. Monte Carlo estimate of the dynamical critical exponent of the 2D kinetic Ising model/J.K.Williams // J. Phys. A.- 1985.- V. 18.- № 1.- P. 49–60.
- [176] Tobochnik J. Dynamic Monte Carlo renormalization group/J.Tobochnik,S.Sarker,R.Cordery // Phys. Rev. Lett. — 1981. — V. 46, No. 21. — P. 1417–1420.
- [177] Monte Carlo renormalization group study of two-dimensional Glauber model/S.L.Katz,J.D.Gunton,C.P.Liu // Phys. Rev. B.- 1982.- V. 25.- № 9.- P. 6008–6011.
- [178] Takano H. Finite-size scaling approach to the kinetic Ising model./H.Takano// Progr.Theor.Phys. - 1982-v.68 - N2. - P.493-507.
- [179] MacIsaac K. On the dynamic exponent of the two-dimensional Ising model/K.MacIsaac,N.Jan // J. Phys. A.- 1992.- V. 25.- P. 2139–2145.
- [180] Lage E.J.S. Critical dynamics of the pure and diluted two-dimensional Ising model /E.J.S.Lage// J. Phys. C. -1986.- V. 19.- № 1.- P. L91–L95.

- [181] Henley C.K. Critical Ising spin dynamics on percolations clusters/C.K.Henley// Phys. Rev. Lett. -1985.- V. 54.- № 18. - P. 2030–2033.
- [182] Racz Z. Linear and nonlinear critical slowing down in the kinetic Ising model: high-temperature series/Z.Racz, M.F.Collins // Phys. Rev. B. -1976. - V. 13.- № 11.- P. 3074–3077.
- [183] Aeppli G. Spin dynamics near the magnetic percolation threshold/G.Aeppli, H.Guggenheim, Y.J.Uemura// Phys. Rev. Lett. -1984.- V. 52.- № 11.- P. 942–945.
- [184] Pawlak A. Sound attenuation and dispersion in a diluted Ising model/A. Pawlak, B.Fechner // Phys. Rev. B. — 1989. — V. 40, No. 13. — P. 9324.
- [185] Вакилов А.Н. Исследование неравновесной критической релаксации в трехмерной неупорядоченной модели Изинга./П.В. Прудников, В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницын А.С. // Вестник Омского университета. - 2007.- В.3.- С.15-19.
- [186] Вакилов А.Н. Динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем/ А.Н.Вакилов, Д.В. Талашок, А.О. Рашев // Вестник Омского университета.- 2009.- Вып.4.- С.114-119.
- [187] Вакилов А.Н. Исследование неравновесной критической релаксации в слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга /В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, В.Н. Бородихин, А.С.Криницын, А.А. Кролевец // Вестник Омского университета.- 2008.- Вып.3.- С.19-24.
- [188] Prudnikov V.V. Short-time dynamics and critical behavior of the three-dimensional site-diluted Ising model/ P.V.Prudnikov, V.V.Prudnikov, A.S. Krinitsyn, A.N.Vakilov, E.A.Pospelov, M.V. Rychkov // Physical Review E.- 2010.- V.81. -P. 011130-1 011130-11.
- [189] Прудников В.В. Численные исследования неравновесной критической релаксации сильно неупорядоченной модели Изинга с точечными дефектами /В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Вакилов, Е.А.Поспелов,

А.Ю.Питеримов, А.В.Чабров // Вестник Омского университета.- 2012.- № 2.- С. 101-105.

- [190] Прудников В.В. Динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, Д.В. Талашок // Письма в ЖЭТФ. - 2014.- Т. 100.- № 9-10.- С. 760-765.
- [191] Вакилов А.Н. Исследование неравновесной критической релаксации в трехмерной слабо неупорядоченной модели Изинга / А.Н.Вакилов, А.С.Креницын, В.В.Прудников, П.В.Прудников // Сб. трудов Международной конференции "Фазовые переходы критические нелинейные явления в конденсированных средах Махачкала Институт физики ДагНЦ РАН-2007, С.79-80
- [192] Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных ферромагнетиков / В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Вакилов, А.С.Креницын, М.В. Рычков // Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Выпуск 1. Вычислительная физика, Москва: Издательство КДУ -2009, с. 240-263.
- [193] Вакилов А.Н. Коротковременная динамика возмущения начального состояния неупорядоченной модели Изинга / Д.В.Талашок, В.В. Прудников, А.Н. Вакилов // Тезисы докладов Международной конференции, посвящённой 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова.- Челябинск-2015, с.113
- [194] Свид. № 2011612758 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программная система расчета характеристик неравновесной критической динамики слабо неупорядоченной модели Изинга с применением параллельных методов / Прудников П.В., Прудников В.В., Поспелов Е.А., **Вакилов А.Н.**; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им.Ф.М.Достоевского (RU) дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 06.04.2011.

- [195] Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics/B.Zheng // Int. J. Mod. Phys. B. — 1998. — V. 12. — P. 1419–1484.
- [196] Jaster A. Short-time critical dynamics of the three-dimensional Ising model/A.Jaster,J. Mainville,L.Schulke,B.Zheng // J.Phys. A.- 1999. - V. 32. - P. 1395.
- [197] Прудников П.В. Ренормгрупповое описание процессов неравновесной критической релаксации в коротковременном режиме: трехпетлевое приближение/П.В.Прудников,В.В.Прудников,И.А.Калашников,С.С.Циркин // ЖЭТФ. — 2008. — Т. 133, вып. 6. — С. 1251–1257.
- [198] Schehr G. Non-equilibrium critical dynamics in disordered ferromagnets/G.Schehr,R.Paul// J. Phys: Conf. Series. — 2006. — V. 40. — P. 27.
- [199] Ballesteros H.G. Finite size effects on measures of critical exponents in $d = 3$ $O(N)$ models /H.G.Ballesteros,L.A Fernandez,V. Martin-Mayor,M.Sudupe M.// Phys. Lett. B.- 1996. - V. 387.- P. 125-131;
- [200] Rosov N.Dynamic critical behavior of the random-exchange Ising system $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$ determined via Mossbauer spectroscopy/N.Rosov, C.Hohenemser,M.Eibschutz // Phys. Rev. B. — 1992. — V. 46. — P. 3452.
- [201] Heuer H.-O. Critical crossover phenomena in disordered Ising systems /H.-O.Heuer// J. Phys. A. -1993.- V. 26.- № 6.- P. L333–L339.
- [202] Rosov N. Single-crystal Mossbauer measurement of the critical exponent ν in the random-exchange Ising system $Fe_{0.9}Zn_{0.1}F_2$ /N.Rosov, A.Kleinhammes,P.Lidbjork,C.Hohenemser,M.Eibschutz// Phys. Rev. B. — 1988. — V. 37. — P. 3265.
- [203] Poole P.H. Dynamical properties of the two - and three-dimensional Ising models by «damage spreading»/P.H.Poole, N.Jan N.// J. Phys. A. -1990. - V. 23. - P. L453–L459.
- [204] Grassberger P. Damage spreading and critical exponents for model A Ising dynamics /P.Grassberger// Physica A. -1995.- V. 214. - P. 547.

- [205] Gropengiessen U. Damage spreading and critical exponents for model A Ising dynamics/U.Gropengiessen // Physica A.- 1995.- V. 215.- № 3.- P. 308–310.
- [206] Heuer H.-O. Monte Carlo simulation of disordered 2-dimensional Ising systems /Heuer H.-O.// Europhys. Lett. - 1991.- V. 16.- № 5.- P. 503–508.
- [207] Parisi G.Universality in the offequilibrium critical dynamics of the three-dimensional diluted Ising model/G.Parisi,F. Ricci-Tersenghi,J.J.Ruiz-Lorenzo // Phys. Rev. E. — 1999. — V. 60. — P. 5198.
- [208] Hasenbusch M. Relaxational dynamics in 3D randomly diluted Ising models/M.Hasenbusch,A.Pelissetto,E.Vicari //J.Stat.Mech.Theor.Exp. - 2007 - N. 11 - P.11009
- [209] Dorogovtsev S.N. The critical behaviour of systems with correlated defects/S.N.Dorogovtsev // J.Phys. A.- 1984.- V. 17.- P. L677–L679.
- [210] Prudnikov V.V. On the critical dynamics of disordered spin systems with extended defects/V.V.Prudnikov // J.Physics C: Solid State.- 1983.- V. 16.- № 19.- P. 3685–3691.
- [211] Ehlers G. Study of slow dynamic processes in magnetic systems by neutron spin-echo spectroscopy/G.Ehlers//J.Phys.Condens.Matter - 2006 -V.18. - P.231-245
- [212] Henkel M. Non-equilibrium Phase Transitions. Vol.II Ageing and dynamical scaling far from equilibrium./M.Henkel, M.Pleimling - Dordercht:Springer. - 2010, 544 p.
- [213] Gambassi A. Relaxation phenomena at criticality/A.Gambassi //Eur.Phys. J. B. -2008 - V.64. - P.379-387.
- [214] Прудников П.В. Неравновесная критическая релаксация структурно неупорядоченных систем в коротковременном режиме: ренорм-групповое описание и компьютерное моделирование/П.В.Прудников, В.В.Прудников, И.А. Калашников,М.В.Рычков// ЖЭТФ. — 2010. — Т. 137, вып. 2. — С. 287–300.

- [215] Prudnikov P.V. Non-equilibrium critical relaxation of the 3d Heisenberg magnets with long-range correlated disorder/P.V. Prudnikov ,M.A.Medvedeva // Progress of Theoretical Physics. — 2012. — V. 127. — P. 369–382.
- [216] Prudnikov V.V. Influence of disorder on critical ageing in 3D Ising model/ V.V. Prudnikov, P.V.Prudnikov,Е.А.Pospelov,А.Н.Vakilov // Physics Letters A.- 2015.- V.379.- № 8.- P. 774-778.
- [217] Prudnikov V.V. Aging and non-equilibrium critical phenomena in Monte Carlo simulations of 3D pure and diluted Ising models/ V.V.Prudnikov , P.V.Prudnikov,Е.А. Pospelov, P.N.Malyarenko,А.Н. Vakilov // Progress of Theoretical and Experimental Physics.- 2015.- Т. 2015.- № 5. С. 053A01.
- [218] Свид. № 2071461354 Российская Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Комплекс моделирования неравновесных фазовых превращений в сильно неупорядоченных спиновых системах/Прудников П.В., Прудников В.В.,**Вакилов А.Н.**, Пospelov А.Н., Медведева М.А., Попов И.С.; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО ОмГУ им.Ф.М.Достоевского (RU). дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 28.03.2014.
- [219] Бочков Г.Н. К общей теории тепловых флуктуаций в нелинейных системах /Г.Н.Бочков,Ю.Е.Кузовлев//ЖЭТФ.- 1977 -Т.72. - С.238-251
- [220] Janke W. Monte Carlo methods in classical statistical physics/W.Janke//Lecture Notes in Physics - Berlin:Springer -2008. - V.739. - P.79-140.
- [221] Ricci-Tersenghi F. Measuring the fluctuation-dissipation ratio in lassy systems no perturbing field/F.Ricci-Tersenghi //Phys.Rev.E.-2003-V.68.-P.065104