ЖЭТФ, 2014, том 145, вып. 3, стр. 462–471

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА ЭФФЕКТЫ СТАРЕНИЯ И НАРУШЕНИЯ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНОЙ ТЕОРЕМЫ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

В. В. Прудников[*]*, П. В. Прудников*[**]*, Е. А. Поспелов*

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

Поступила в редакцию 15 июня 2013 г.

Численно исследованы методом Монте-Карло особенности неравновесного критического поведения трехмерной структурно-неупорядоченной модели Изинга. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционных функций и динамической восприимчивости для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.8$, 0.6 были выявлены эффекты старения, характеризующиеся замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания, и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы. Для рассматриваемых систем методом Монте-Карло получены значения универсального предельного флуктуационно-диссипативного отношения. Показано, что присутствие дефектов структуры приводит к усилению эффектов старения и увеличению значений предельного флуктуационно-диссипативного отношения.

DOI: 10.7868/S0044451014030082

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает значительный интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения [1–4]. 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 [5–7]. В то же время данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [8–10], могут наблюдаться и в ферромагнитных системах в окрестности точки фазового перехода 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, становится новой универсальной характеристикой для критического поведения различных систем [8].

В работе решается задача численного исследования методами Монте-Карло особенностей влияния вмороженных точечных дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения трехмерных спиновых систем, описываемых моделью Изинга. Следует отметить, что к классу универсальности критического поведения трехмерной модели Изинга принадлежат реальные анизотропные магнитные системы с анизотропией типа «легкая ось» [11]. Изучение релаксационной динамики ферромагнитных систем, с одной стороны, проводить значительно легче, чем излучение таких сложных неупорядоченных систем с эффектами фрустрации, как спиновые стекла, а с другой стороны, эти системы на неравновесном этапе критической эво-

[*] E-mail: prudnikv@univer.omsk.su
[**] E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

люции демонстрируют аналогичные спиновым стеклам эффекты старения и отклонение предельной величины флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО) от единицы, как показателя неравновесности системы.

Ренормгрупповые [12, 13], численные [14–17] и экспериментальные [18] 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 дальнодействующей корреляции, приводит к новым типам критического поведения и к 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 ФДО, проведенные в работах [19, 20] 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 ФДО для структурно-неупорядоченной и «чистой» модели Изинга. В работе [21] были проведены исследования эффектов старения в неупорядоченной модели Изинга, сочетающие ренормгрупповой расчет в рамках метода ε-разложения двухвременной зависимости для автокорреляционной функции и функции отклика, уточнившие для них результаты работы [20] при сохранении полученного в работе [20] значения предельного ФДО, и расчеты методом Монте-Карло поведения автокорреляционной функции для различных спиновых концентраций в трехмерной модели Изинга. Однако в работе [21] не были проведены исследования Монте-Карло ни для функции отклика, ни для флуктуационно-диссипативного отношения.

Стоит отметить, что аналитические ренормгрупповые методы исследования критического поведения примесных систем применимы лишь для слаборазбавленных магнетиков при концентрациях дефектов $(1-p) \ll 1$, где величина p задает спиновую концентрацию. При увеличении разбавления системы немагнитными атомами примеси при спиновых концентрациях $p_c^{(s)} < p < p_c^{(imp)} = 1 - p_c^{(s)}$, где $p_c^{(s)}$ и $p_c^{(imp)}$ — соответственно пороги спиновой и примесной перколяции (для кубических решеток с взаимодействием ближайших соседей $p_c^{(s)} \approx 0.31$, $p_c^{(imp)} \approx 0.69$), примеси образуют связывающий кластер, который для $T \leq T_c$ сосуществует со спиновым связывающим кластером вплоть до $p_c^{(s)}$, образуя фрактороподобную структуру с эффективной дальнодействующей пространственной корреляцией в распределении примесей [22]. Изменение эффектов рассеяния флуктуаций параметра порядка на атомах примеси должно сопровождаться появлением новых неподвижных точек для вершин взаимодействия флуктуаций параметра порядка и, следовательно, как впервые было предсказано в работе [23], область $p_c^{(s)} < p < p_c^{(imp)}$ характеризуется новым типом критического поведения трехмерной модели Изинга, соответствующим области сильной структурной неупорядоченности.

Такие универсальные характеристики критического поведения, как критические индексы, полученные для структурно-неупорядоченной модели Изинга с применением ренормгруппового теоретико-полевого описания при фиксированной размерности системы $d = 3$ и различных методов суммирования рядов теории, характеризуются значениями $\nu = 0.678(10)$, $\beta = 0.349(5)$, $\gamma = 1.330(17)$, $\omega = 0.25(10)$ [24], $z = 2.179(1)$ [25], $\theta' = 0.120$ [15] (для статических и динамических показателей приведены значения, полученные с лучшей доступной на данный момент точностью) и достаточно хорошо согласуются с результатами экспериментального исследования изингоподобных магнетиков $\mathrm{Fe}_p\mathrm{Zn}_{1-p}\mathrm{F}_2$ при спиновой концентрации $p = 0.9$: $\nu = 0.70(2)$, $\gamma = 1.34(6)$ [26], $\beta = 0.350(9)$, $z = 2.18(10)$ [18, 27]. Экспериментальные исследования сильнонеупорядоченных магнетиков дали значения $\nu = 0.73(3)$, $\gamma = 1.44(6)$ [28] для $\mathrm{Fe}_p\mathrm{Zn}_{1-p}\mathrm{F}_2$ при $p = 0.6$, $\nu = 0.75(5)$, $\gamma = 1.57(16)$ [29] для $\mathrm{Mn}_p\mathrm{Zn}_{1-p}\mathrm{F}_2$ при $p = 0.5$.

Результаты численных исследований Монте-Карло критического поведения структурно-неупорядоченной трехмерной модели Изинга достаточно противоречивы: результаты одних исследователей направлены на защиту концепции независимости значений критических индексов от концентрации дефектов вплоть до порога перколяции с $\nu = 0.684(5)$, $\beta = 0.355(3)$, $\gamma = 1.342(10)$ [30], $z = 2.62(7)$ [31], $z = 2.35(2)$ [32], $\theta' = 0.10(2)$ [33], получаемых при некоторой процедуре подгонки промежуточных значений индексов и амплитуд в скейлинговой зависимости вычисляемых термодинамических характеристик для различных спиновых концентраций с использованием подбираемого индекса поправки к скейлингу $\omega = 0.370(63)$ [30], $\omega = 0.50(13)$ [31], $\omega_2 = 0.82(8)$ [32]; результаты других исследователей указывают на существование двух универсальных классов критического поведения для слабонеупорядоченных систем с $\nu = 0.68(2)$, $\beta = 0.34(2)$ [34], $z = 2.38(1)$ [35], $\nu = 0.682(3)$, $\beta = 0.344(3)$ [36], $\nu = 0.683(4)$, $\beta = 0.310(3)$, $\gamma = 1.299(3)$ [37], $\nu = 0.696(3)$, $\gamma = 1.345(4)$, $\omega = 0.23(13)$ [14], $z = 2.20(7)$ [23], $z = 2.191(21)$, $\omega = 0.256(55)$, $\theta' = 0.127(16)$ [15] и сильнонеупорядоченных систем с $\nu = 0.72(2)$, $\beta = 0.33(2)$, $\gamma = 1.51(3)$ [34], $z = 2.53(3)$ [35], $\nu = 0.717(7)$, $\beta = 0.313(12)$ [36], $\nu = 0.725(6)$, $\beta = 0.349(4)$, $\gamma = 1.446(4)$ [37], $\nu = 0.725(4)$, $\gamma = 1.415(11)$, $\omega = 0.28(15)$ [14], $z = 2.58(9)$ [23], $z = 2.663(30)$, $\omega = 0.286(10)$, $\theta' = 0.167(18)$ [42, 43].

Проведенные в данной работе численные исследования методом Монте-Карло всех двухвременных характеристик неравновесного критического поведения для «чистой» и структурно-неупорядоченной трехмерной моделей Изинга, непертурбативные по своей основе, позволят более однозначно ответить на вопрос об относительном соответствии значений предельного ФДО для структурно-неупорядоченной и «чистой» моделей Изинга и выделить влияние дефектов структуры на эффекты старения и значения ФДО в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга со спиновыми концентрациями как в области слабой, так и в области сильной ее неупорядоченности.

2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И МОДЕЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Эффекты старения, проявляющиеся на неравновесном этапе релаксации системы с медленной динамикой, характеризуются существованием двухвременных зависимостей для корреляционной функции и функции отклика от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t - t_w$. Для спиновой системы корреляционная функция определяется выражением ($t > t_w$)

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

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

$$R\,(t, t_w) = \frac{1}{V}\int d^dx\,\left.\frac{\delta\,\langle S(x,t)\rangle}{\delta h(x,t_w)}\right|_{h=0}. \quad (2)$$

Время ожидания определяется временем, прошедшим с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В течение $(t - t_w) \ll t_{rel}$, 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.

Еще одним проявлением медленной динамики является нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) [8–10, 38], которая связывает функцию отклика системы и корреляционную функцию соотношением

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T}\,\frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (3)$$

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

$$X^\infty = \lim_{t_w\to\infty}\lim_{t\to\infty} X(t, t_w) \quad (4)$$

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

Корреляционная функция и функция отклика в неравновесном критическом состоянии системы характеризуются следующими скейлинговыми зависимостями [39]:

$$\begin{aligned} C(t, t_w) &\propto (t - t_w)^{a+1-d/z}\,(t/t_w)^{\theta-1}\,f_C(t/t_w),\\ R(t, t_w) &\propto (t - t_w)^{a-d/z}\,(t/t_w)^{\theta}\,f_R(t/t_w) \end{aligned} \quad (5)$$

с конечными функциями $f_C(t/t_w)$ и $f_R(t/t_w)$ при $t_w \to 0$. Показатели a и θ связаны с критическими индексами рассматриваемой системы. Так, $a = (2 - \eta - z)/z$, $\theta = \theta' - z^{-1}(2 - z - \eta)$, где z — динамический критический индекс, определяющий температурную зависимость времени релаксации $\tau_{rel} \propto |T - T_c|^{-z\nu}$ с критическим индексом корреляционной длины ν; η — критический индекс пространственной корреляции (индекс Фишера); θ и θ' — динамические критические индексы, характеризующие соответственно неравновесную критическую эволюцию функции отклика $R(t, t_w)$ и намагниченности $M(t)$.

Линейная функция отклика (2) не может быть непосредственно измерена экспериментально или получена методами компьютерного моделирования. Более удобной величиной является интегральная характеристика — динамическая восприимчивость

$$\chi(t,t_w) = \int\limits_{t_w}^{t} dt' R(t,t'). \tag{6}$$

Методами Монте-Карло восприимчивость $\chi(t,t_w)$ для трехмерной системы может быть рассчитана на основе следующего соотношения:

$$\chi(t,t_w) = \frac{1}{L^3 h^2} \sum_i \overline{\langle h_i(t_w) S_i(t) \rangle}, \tag{7}$$

где h_i — малое случайное бимодальное магнитное поле, черта сверху обозначает процедуру усреднения по различным реализациям магнитного поля.

В данной работе проведены исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении трехмерной неупорядоченной модели Изинга. Гамильтониан модели задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j, \tag{8}$$

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. Дефекты структуры распределялись в системе каноническим образом в соответствии с функцией распределения $P(p_i) = (1-p)\delta(p_i) + p\delta(1-p_i)$.

Осуществлялось вычисление автокорреляционной функции $C(t,t_w)$,

$$C(t,t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} p_i S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle \right], \tag{9}$$

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

$$\chi(t,t_w) = \left[\overline{\left\langle \frac{1}{h^2 pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} p_i h_i(t_w) S_i(t) \right\rangle} \right], \tag{10}$$

где p задает концентрацию спинов в кубической решетке с линейным размером L, угловые скобки означают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные — усреднение по различным конфигурациям распределения дефектов в решетке.

Для вычисления динамической восприимчивости $\chi(t,t_w)$ в момент времени t_w к гамильтониану добавлялось возмущение $\delta H = -\sum_i h_i S_i$, где случайное магнитное поле задавалось бимодальным распределением $\pm h$ на узлах кристаллической решетки [9].

Динамика системы моделировалась с помощью алгоритма Метрополиса. Данный алгоритм односпинового переворота хорошо зарекомендовал себя при исследовании неравновесного критического поведения [9, 12, 15, 17] и соответствует релаксационной динамической модели A в классификации Гальперина – Хоэнберга [40]. Это позволяет сравнивать результаты компьютерного моделирования с ренормгрупповыми теоретико-полевыми расчетами характеристик неравновесного критического поведения для слабонеупорядоченных систем. В качестве единицы времени в работе используется шаг Монте-Карло на спин (MCS/s), под которым понимается $N = pL^3$ переворотов спинов в единицу времени.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

Моделирование системы проводилось на решетке спинов с линейным размером $L = 128$ с наложенными периодическими граничными условиями при спиновых концентрациях $p = 0.8$, 0.6 и соответствующих критических температурах $T_c = 3.4995(2)$, 2.4241(1) [14, 15]. Формировалось высокотемпературное при $T \gg T_c$ начальное состояние системы с малым значением намагниченности $M_0 \ll 1$ ($M_0 = 0.01$ для $p = 0.8$ и $M_0 = 0.005$ для $p = 0.6$), которое для исследуемого критического режима при $T = T_c$ являлось существенно неравновесным. Поведение системы исследовалось на временах до 10000 шагов Монте-Карло на спин для времен ожидания $t_w = 50$, 250, 500, 1000 MCS/s. Значение поля h задавалось равным 0.01. Итоговые зависимости были получены путем усреднения по 1000 примесных конфигураций, для каждой из которых усреднение проводилось по 20 реализациям начального состояния и 10 реализациям случайного магнитного поля.

На рис. 1 в двойном логарифмическом масштабе представлены графики вычисленной временной эволюции автокорреляционной функции для систем с $p = 0.8$, 0.6 для различных времен ожидания. Из графиков наглядно видно, что в двухвременном поведении автокорреляционной функции можно выделить несколько режимов. Так, для $t - t_w \ll t_w$ в ее поведении отсутствует зависимость от времени ожи-

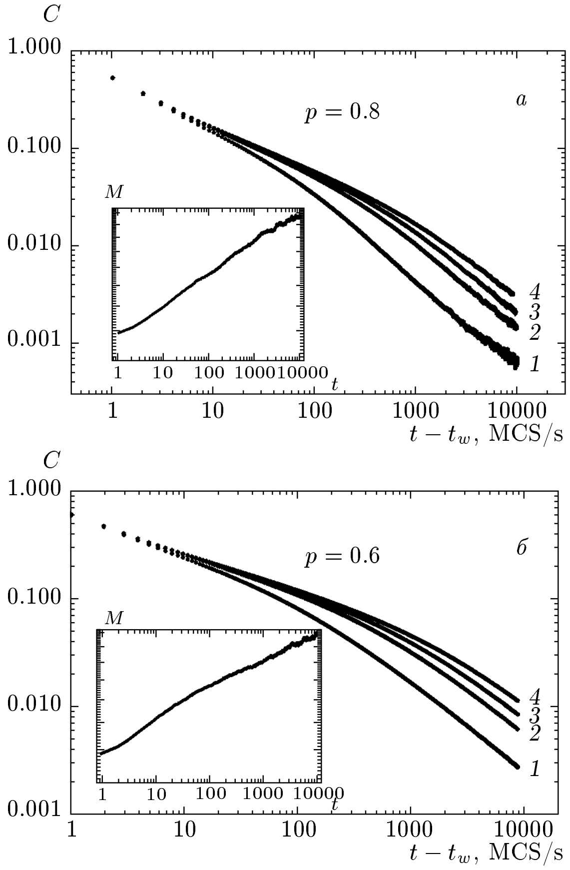

Рис. 1. Зависимость автокорреляционной функции C от $(t-t_w)$ в двойном логарифмическом масштабе для разной концентрации спинов p. Данные приведены для различных времен ожидания t_w: *1* — 50; *2* — 250; *3* — 500; *4* — 1000

дания и $C(t,t_w) = C(t-t_w)$, т.е. реализуется квазиравновесный режим, характеризуемый степенной зависимостью $C(t-t_w) \propto (t-t_w)^{-(d-2+\eta)/z}$, где d — размерность системы.

На временах наблюдения $t-t_w$ и ожидания t_w достаточно больших, но сравнимых друг с другом ($t-t_w \sim t_w \gg 1$), во временной зависимости $C(t,t_w)$ проявляется существенная зависимость от времени ожидания t_w, характеризующая эффекты старения, т.е. замедление спадания временной корреляции в системе с увеличением ее «возраста» t_w. Аппроксимируя на этом этапе при $T = T_c$ поведение автокорреляционной функции степенной зависимостью $C(t,t_w) \propto (t-t_w)^{-\lambda}$, мы определили значения показателя λ для различных значений t_w. Приведенные в табл. 1 значения λ указывают на замедление эволюции системы с ростом t_w, при этом увеличение концентрации дефектов приводит к усилению эффектов старения.

Таблица 1. Значения критического показателя λ для систем со спиновой концентрацией $p = 0.8,\ 0.6$

t_w	λ	
	$p = 0.8$, $t-t_w = (160\text{–}1600)$	$p = 0.6$, $t-t_w = (300\text{–}1200)$
50	0.938(34)	0.746(32)
250	0.739(40)	0.604(45)
500	0.644(25)	0.531(40)
1000	0.569(30)	0.467(36)

Для этапа с $t-t_w \sim t_w \gg 1$ двухвременные динамические функции можно охарактеризовать следующими зависимостями [41]:

$$\begin{aligned} &C(t,t_w) \propto t_w^{-(d-2+\eta)/z} F_c(t/t_w), \\ &R(t,t_w) \propto t_w^{-1-(d-2+\eta)/z} F_R(t/t_w). \end{aligned} \tag{11}$$

Поведение скейлинговых функций $F_c(t/t_w)$ и $F_R(t/t_w)$ хорошо известно для этапа существенно неравновесной эволюции системы с $t \gg t_w \gg 1$:

$$\begin{aligned} &F_c(t/t_w) \approx A_C (t/t_w)^{-c_a}, \\ &F_R(t/t_w) \approx A_R (t/t_w)^{-c_r} \end{aligned} \tag{12}$$

с показателем $c_a = c_r = d/z - \theta'$. Здесь критический индекс θ' характеризует рост намагниченности $M(t) \propto t^{\theta'}$ при неравновесной критической эволюции системы из начального состояния с $M_0 \ll 1$ (см. вставки на рис. 1).

Для подтверждения скейлинговой зависимости автокорреляционной функции (11) было осуществлено построение зависимости $t_w^{(1+\eta)/z} C(t,t_w)$ от t/t_w. Результат приведен на рис. 2, который демонстрирует «коллапс» полученных данных для различных t_w на соответствующих $p = 0.8$ и $p = 0.6$ универсальных кривых, отвечающих скейлинговой функции $F_c(t/t_w)$ в (11). Для анализа были использованы значения критических индексов $z = 2.191(21)$ и $1+\eta = 2\beta/\nu = 1.016(32)$ в случае слабонеупорядоченной системы с $p = 0.8$ [15] и значения $z = 2.663(30)$ и $1+\eta = 0.924(80)$ для сильнонеупорядоченной системы с $p = 0.6$ [42, 43].

На основе анализа полученных данных для зависимости $t_w^{(1+\eta)/z} C(t,t_w)$ от t/t_w были вычислены значения показателя c_a для скейлинговой функции (12): $c_a(p = 0.8) = 1.237(22)$ и $c_a(p = 0.6) =$

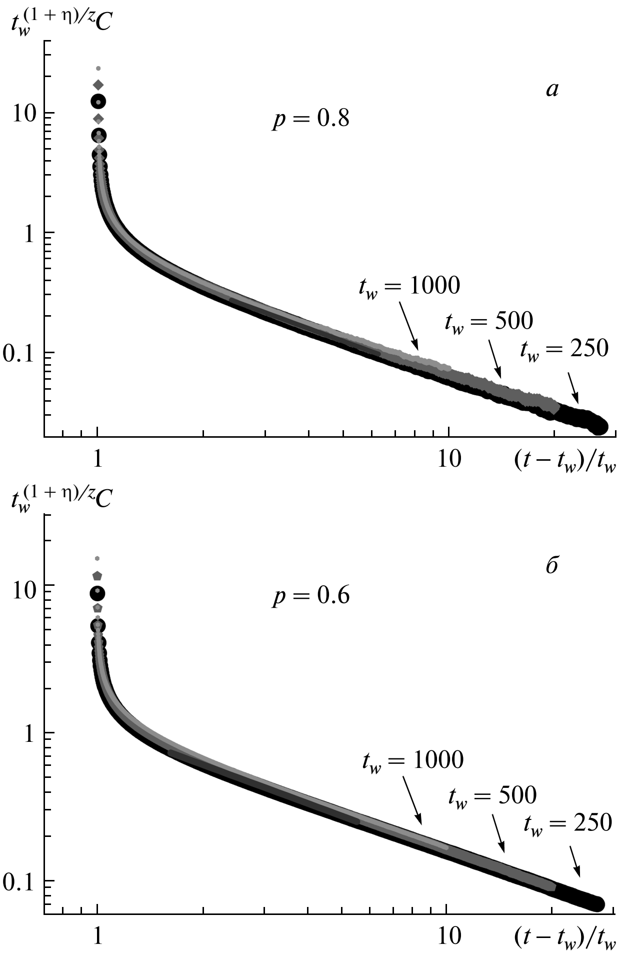

Рис. 2. Демонстрация реализации скейлинговой зависимости для автокорреляционной функции (11) при различных временах ожидания t_w для разных спиновых концентраций p

$= 0.982(30)$. Значение показателя c_a для слабонеупорядоченной системы с $p = 0.8$ хорошо согласуется в пределах погрешности с вычисленным в работе [15] значением $c_a = 1.242(10)$ при применении метода коротко-временной динамики с учетом ведущих поправок к скейлингу и слабо согласуется со значением $c_a = 1.05(3)$, полученным в работе [21] при исследовании неравновесной критической динамики в неупорядоченной модели Изинга. Причины этого несоответствия детально обсуждались нами в работе [15].

Скейлинговое поведение в режиме $t - t_w \gg t_w \gg 1$ динамических функций $C(t, t_w)$ и $R(t, t_w)$, определяемое соотношением (11), приводит к функциональной зависимости флуктуационно-диссипативного отношения $X(t, t_w)$ только от (t/t_w) [44]

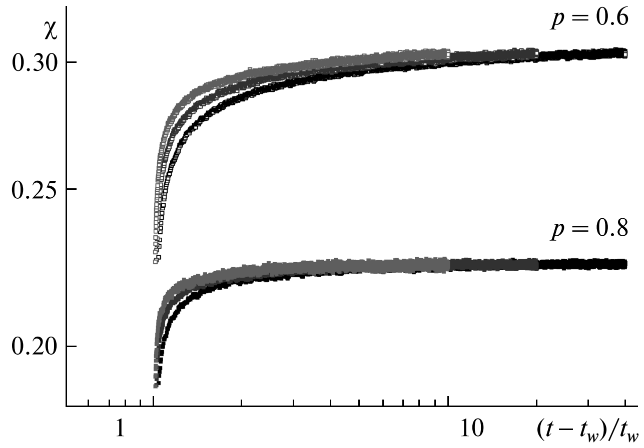

Рис. 3. Зависимость обобщенной восприимчивости χ от $(t - t_w)/t_w$ в двойном логарифмическом масштабе для разной концентрации спинов p и для различных времен ожидания t_w

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t/t_w)}{(\partial/\partial t_w)C(t/t_w)} \propto \propto \frac{F_R(t/t_w)}{(2\beta/\nu z)\,F_c(t/t_w) + (t/t_w)\,F_c'(t/t_w)}. \quad (13)$$

Данное поведение $X(t, t_w)$ подтверждается ренормгрупповыми расчетами [19].

Данное представление позволило для получения значения предельного ФДО в работе [44] применить линейную аппроксимацию по $t_w/t \to 0$ к набору полученных данных для ряда двумерных спиновых систем (модель Изинга, модель Поттса с числом состояний $q = 4$, модель «Clock» с числом состояний $q = 3$) ввиду их слабой зависимости от t_w. В случае трехмерной модели Изинга полученные нами данные демонстрируют заметную зависимость от t_w, поэтому для получения значения предельного ФДО мы в соответствии с формулой (4) применили процедуру получения сначала $X^\infty(t_w) = \lim_{t\to\infty} X(t, t_w)$, а затем искомого предельного ФДО $X^\infty = \lim_{t_w\to\infty} X^\infty(t_w)$.

Принадлежность к классу универсальности, как «чистой», так и неупорядоченной систем, проявляется в универсальности значений критических индексов и отношений критических амплитуд. Исходя из скейлинговых соотношений (12) и (13), предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения принимает вид

$$X^\infty = \lim_{t_w\to\infty}\lim_{t\to\infty} X(t, t_w) = \frac{A_R}{A_C}\left[c_a - \frac{2\beta}{\nu z}\right]^{-1} \quad (14)$$

и также становится новой универсальной характеристикой критического поведения.

Таблица 2. Значения флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для систем со спиновой концентрацией $p = 1.0,\ 0.8,\ 0.6$

t_w	X^∞	t_w	X^∞	
	$p = 1.0$		$p = 0.8$	$p = 0.6$
10	0.586(24)	250	0.708(15)	0.726(13)
25	0.460(52)	500	0.544(23)	0.583(14)
50	0.437(63)	1000	0.494(17)	0.519(29)
∞	**0.390(12)**		**0.415(18)**	**0.443(6)**

Значения флуктуационно-диссипативного отношения могут быть получены на основе вычисленных нами временных зависимостей для автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ и восприимчивости $\chi(t,t_w)$ (рис. 3), если выразить в соответствии с формулами (3) и (6) величину $T\chi(t,t_w)$ как функцию $C(t,t_w)$:

$$T\chi(t,t_w) = \int\limits_{t_w}^{t} X(t,t')\frac{\partial C(t,t')}{\partial t'}\,dt' = \int\limits_{C(t,t_w)}^{1} X(C)\,dC. \quad (15)$$

Для этого зависимость $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$ представим в виде некоторой кривой (рис. 4), асимптотическая кривизна которой и будет задавать значение $X^\infty(t_w)$:

$$X^\infty(t_w) = -\lim_{C\to 0}\frac{d(T\chi)}{dC}. \quad (16)$$

Получая $X^\infty(t_w)$ для различных времен ожидания и затем осуществляя аппроксимацию $X^\infty(t_w\to\infty)$, определяем искомое предельное флуктуационно-диссипативное отношение X^∞.

На рис. 4 представлены полученные параметрические зависимости $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$ при $t_w = 1000$ MCS/s для спиновых концентраций $p = 1.0$; 0.8, 0.6. Линией отмечена прямая, соответствующая квазиравновесному поведению системы с выполнением ФДТ и $X(t,t_w) = 1$. Данные зависимости $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$ демонстрируют нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы для неравновесного критического поведения как для «чистой», так и для неупорядоченной модели Изинга. Указанные зависимости и флуктуационно-диссипативные отношения вычислялись при значениях времени ожидания $t_w = 250$, 500, 1000 MCS/s для структурно-неупорядоченных систем и $t_w = 10$, 25, 50 MCS/s для «чистой» системы. В табл. 2 приведены значения $X^\infty(t_w)$, определенные для различных времен ожидания. Отметим, что значения $X^\infty(t_w)$ в согласии с (16) вычисляются в пределе $C(t,t_w)\to 0$, соответствующем этапу с $t \gg t_w \gg 1$. Поэтому на вставке к рис. 4 выделены те участки зависимостей $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$, которые соответствуют этим критериям и на которых были определены значения $X^\infty(t_w)$. Важным при численных исследованиях неравновесного критического поведения является также то, что для трехмерных решеток даже с такими большими линейными размерами, как $L = 128$, в «чистых» системах длительность неравновесного этапа эволюции составляет величину в 1000 MCS/s, в то время как для структурно-неупорядоченных систем при $L = 128$ это уже на порядок большая в 10000 MCS/s характерная величина (подтверждением этого служат вставки на рис. 1). Это позволяет для анализа эффектов старения и значений предельных ФДО в структурно-неупорядоченных системах проводить исследования при значительно больших временах ожидания t_w, чем для «чистых» систем, что повышает достоверность получаемых характеристик для критического состояния системы с аномально большими по амплитудам и долгоживущими флуктуациями параметра порядка.

На рис. 5 представлены вычисленная зависимость $X^\infty(1/t_w)$ и ее аппроксимация к значению X^∞ при $t_w\to\infty$. Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty = 0.415(18)$ для системы со спиновой концентрацией $p = 0.8$ и $X^\infty = 0.443(6)$ для системы с $p = 0.6$ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении структурно-неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, а также на то, что в сильнонеупорядоченных системах с $p = 0.6$ наличие дефектов приводит к большему значению X^∞, чем для слабонеупорядоченных с $p = 0.8$.

Опираясь на информацию из работы [41] о том, что проведенные авторами численные исследования неравновесного критического поведения для «чистой» трехмерной модели Изинга дали предварительные значения $X^\infty \approx 0.4$ (в последующих публикациях авторов отсутствует подтверждение этого результата), а также на реализованные нами исследования данной модели, давшие $X^\infty = 0.390(12)$, можно сделать вывод о том, что присутствие дефектов структуры приводит к новому классу уни-

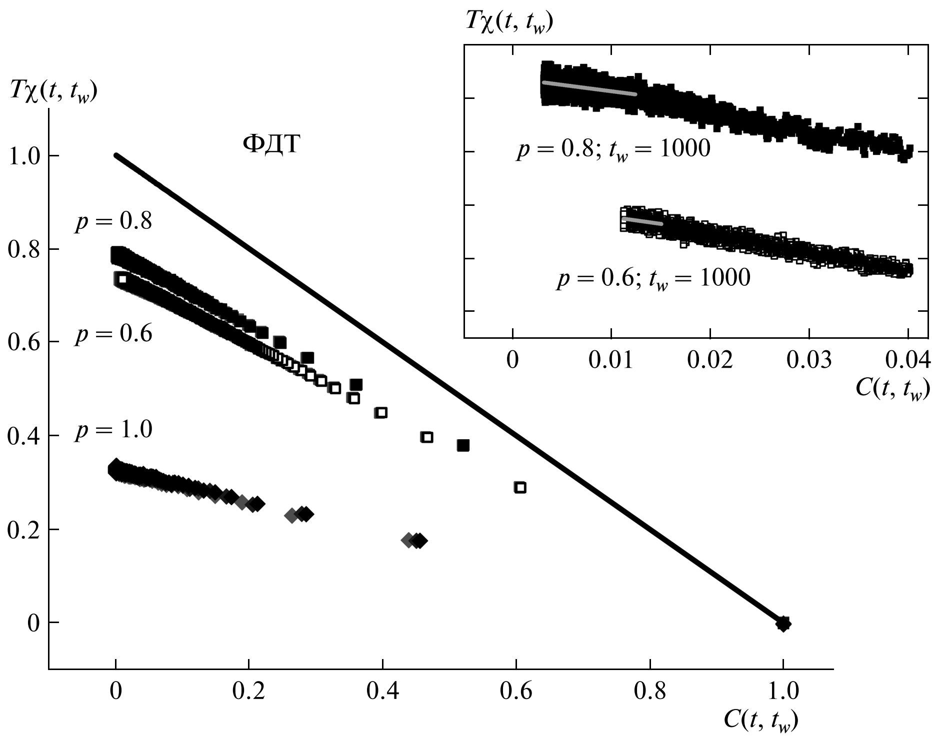

Рис. 4. Графики параметрической зависимости $T\chi(t,t_w)$ от $C(t,t_w)$ при $t_w = 1000$ MCS/s для разных спиновых концентраций p в сравнении с зависимостью при выполнении флуктуационно-диссипативной теоремы

версальности критического поведения для трехмерной модели Изинга, к набору определяющих характеристик которого относятся и значения ФДО с $X^{\infty}_{disorder} > X^{\infty}_{pure}$.

Отметим, что в работе [19] было проведено ренормгрупповое описание неравновесного критического поведения диссипативных систем с несохраняющимся параметром порядка и для них был осуществлен расчет флуктуационно-диссипативного отношения с применением метода ε-разложения во втором порядке теории. Полученное в виде ряда по ε ФДО имело вид

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

где n — число компонент параметра порядка. Для трехмерной модели Изинга с $\varepsilon = 1$ и $n = 1$ при применении метода суммирования аппроксимантов Паде было получено значение $X^{\infty} = 0.429(6)$ (ряд не суммируем по Паде – Борелю или Паде – Борелю – Лерою). В работе [20] в однопетлевом приближении было рассчитано значение X^{∞} для слаборазбавленной модели Изинга:

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

что при $\varepsilon = 1$ приводит к результату $X^{\infty} = 0.416$. Как отмечено авторами, данные результаты вычисления X^{∞} в первом порядке теории для неупорядоченной модели Изинга не позволяют из сопоставления с результатами для однородной модели выделить особенности влияния дефектов на флуктуационно-диссипативное отношение, для этого требуется проведение вычислений в более высоких порядках теории. Тем не менее, отметим, что полученное нами значение предельного ФДО с $X^{\infty} = 0.415(18)$ для слабонеупорядоченной системы со спиновой концентрацией $p = 0.8$ находится в хорошем соответствии в пределах статистических погрешностей с результатом ренормгруппового описания.

Полученное значение предельного ФДО с $X^{\infty} = 0.443(6)$ для сильнонеупорядоченной системы со спиновой концентрацией $p = 0.6$ демонстрирует отличие от значений соответствующей величины $X^{\infty} = 0.415(18)$ для $p = 0.8$ и $X^{\infty} = 0.390(12)$ для

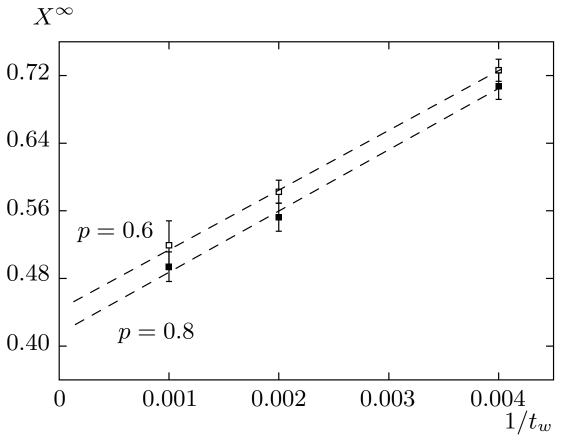

Рис. 5. Получение ФДО путем аппроксимации предельных значений $X^\infty(t_w)$ при $t_w^{-1} \to 0$ для разных p

$p = 1.0$, превышающее пределы статистических погрешностей и проведенных аппроксимаций. Это позволяет сделать вывод о том, что новая универсальная характеристика неравновесного поведения как предельное ФДО и полученные для нее значения указывают на то, что неравновесное критическое поведение «чистых», слабо- и сильнонеупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, принадлежит к различным универсальным классам критического поведения.

Важно отметить, что при подготовке условий и 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 и увеличение их концентрации приводят к существенному усилению эффектов старения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках проекта 2.3046.2011. Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М. В. Ломоносова.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. F. Cugliandolo, *Slow Relaxation and Nonequilibrium Dynamics in Condensed Matter*, Les Houches, Ecole d'Ete de Physique Theorique, ed. by J.-L. Barrat et al., Springer, Berlin, Vol. 77 (2003), p. 371.
2. M. Henkel and M. Pleimling, in *Nonequilibrium Phase Transitions*, Springer, Heidelberg, Vol. 2 (2010), p. 544.
3. N. Afzal and M. Pleimling, Phys. Rev. E **87**, 012114 (2013).
4. G. Ehlers, J. Phys: Condens. Matter **18**, R231 (2006).
5. L. Berthier and J. Kurchan, Nature Phys. **9**, 310 (2013).
6. E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio et al., Lect. Notes Phys. **492**, 184 (1997).
7. J. P. Bouchaud, L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mezard, in *Spin Glasses and Random Fields* (*Directions in Condensed Matter Physics*), ed. by A. P. Young, World Scientific, Singapore, Vol. 12 (1998), p. 443.
8. P. Calabrese and A. Gambassi, J. Phys. A **38**, R133 (2005).
9. L. Berthier, P. C. W. Holdsworth, and M. Sellitto, J. Phys. A **34**, 1805 (2001).
10. A. Gambassi, Eur. Phys. J. B **64**, 379 (2008).
11. W. P. Wolf, Brazilian J. Phys. **30**, 794 (2000).
12. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. А. Калашников и др., ЖЭТФ **137**, 287 (2010).
13. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. А. Калашников и др., ЖЭТФ **133**, 1251 (2008).
14. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов и др., ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
15. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. N. Vakilov et al., Phys. Rev. E **81**, 011130 (2010).
16. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, B. Zheng et al., Progr. Theor. Phys. **117**, 973 (2007).
17. P. V. Prudnikov and M. A. Medvedeva, Progr. Theor. Phys. **127**, 369 (2012).
18. N. Rosov, C. Hohenemser, and M. Eibschutz, Phys. Rev. B **46**, 3452 (1992).
19. P. Calabrese and A. Gambassi, Phys. Rev. E **66**, 066101 (2002).
20. P. Calabrese and A. Gambassi, Phys. Rev. B **66**, 212407 (2002).
21. G. Schehr and R. Paul, Phys. Rev. E **72**, 016105 (2005).

22. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, and A. A. Fedorenko, Phys. Rev. B **62**, 8777 (2000).

23. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, Письма в ЖЭТФ **55**, 709 (1992); ЖЭТФ **103**, 962 (1993).

24. A. Pelissetto and E. Vicari, Phys. Rev. B **62**, 6393 (2000).

25. А. С. Криницын, В. В. Прудников, П. В. Прудников, ТМФ **147**, 137 (2006).

26. Z. Slanic, D. P. Belanger, and J. A. Fernandez-Baca, Phys. Rev. Lett. **82**, 426 (1999).

27. N. Rosov, A. Kleinhammes, P. Lidbjork, C. Hohenemser, and M. Eibschutz, Phys. Rev. B **37**, 3265 (1988).

28. R. J. Birgeneau, R. A. Cowly, G. Shirane et al., Phys. Rev. B **27**, 6747 (1983).

29. P. W. Mitchell, R. A. Cowely, H. Yoshizawa et al., Phys. Rev. B **34**, 4719 (1986).

30. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor et al., Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).

31. G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, Phys. Rev. E **60**, 5198 (1999).

32. M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. P11009 (2007).

33. G. Schehr and R. Paul, J. Phys.: Conf. Ser. **40**, 27 (2006).

34. H.-O. Heuer, Phys. Rev. B **42**, 6476 (1990).

35. H.-O. Heuer, J. Phys. A **26**, L341 (1993).

36. S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1998); Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998).

37. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).

38. P. Calabrese, A. Gambassi, and F. Krzakala, J. Stat. Mech. P06016 (2006).

39. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, Z. Phys. B **73**, 539 (1989); H. K. Janssen, in: *Topics in Modern Statistical Physics*, ed. by G. Gyorgyi et al., World Scientific, Singapore (1992), p. 600.

40. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).

41. C. Godreche and J. M. Luck, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 9141 (2000).

42. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, М. В. Рычков, Тр. Семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика, под ред. Р. Р. Назирова, Изд-во КДУ, Москва (2009), с. 240.

43. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов и др., Вестник Омского университета, Вып. 2, 101 (2012); В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно-неупорядоченных систем*, Наука, Москва (2013).

44. C. Chatelain, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. P06006 (2004).