

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

Маляренко

Маляренко Петр Николаевич

**Численные исследования эффектов старения
и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы
в неравновесном критическом поведении
структурно неупорядоченных спиновых систем**

01.04.02 — Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань — 2020

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВО
«Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»

Научный руководитель: **Прудников Владимир Васильевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Омский государственный университет
им. Ф.М. Достоевского»

Официальные оппоненты: **Овчинников Александр Сергеевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Бараш Лев Юрьевич,
кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник,
ФГБУН «Институт теоретической физики
им. Л.Д. Ландау РАН»

Ведущая организация: ФГБУН «Дагестанский федеральный
исследовательский центр РАН»

Защита состоится 24 декабря 2020 г. в 15 часов 40 минут на заседании
диссертационного совета КФУ.01.03 при Казанском (Приволжском) федеральном
университете по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 16а, ауд. 110

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки
им. Н.И. Лобачевского при ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный
университет» по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 35 и на сайте
<https://kpfu.ru/validation/sobstvennye-sovety-kfu/obyavleniya-o-zaschitah-dissertacij>.

Автореферат разослан «___» _____ 2020 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



В.А. Попов

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Коллективное поведение статистических систем вблизи критической точки характеризуется аномально медленной динамикой. После изменения некоторых термодинамических параметров и условий система в термодинамическом пределе не достигает состояния равновесия. Неравновесная эволюция в этом случае демонстрирует ряд особенностей, обычно наблюдаемых в стекольных системах. К таким особенностям относятся эффекты старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) [1, 2].

Для описания неравновесных явлений проводится исследование свойств динамических восприимчивостей и корреляционных функций параметра порядка. Скейлинговое поведение этих величин описывается универсальными характеристиками: показателями, скейлинговыми функциями и отношениями амплитуд, которые определяются числом компонент параметра порядка и размерностью системы. Такая универсальность позволяет вычислять характеристики систем в разных статистических моделях с применением различных аналитических и численных методов, в том числе и методом численного моделирования Монте-Карло.

Исследование влияния структурного беспорядка на критическое поведение различных статистических систем остается одной из основных проблем физики конденсированного состояния. Беспорядок нарушает трансляционную симметрию кристалла и, таким образом, значительно усложняет теоретическое описание материала. Известно, что критическое поведение системы характеризуется аномально большим откликом на слабые возмущения. Следовательно, наличие даже низкой концентрации дефектов может привести к резким изменениям этого поведения и его характеристик. Применение для сильно разбавленных систем аналитических методов описания связано с рядом трудностей, не позволяющих описать характеристики системы с достаточной степенью точности. Экспериментальные методы исследования материалов требуют высокой чистоты исследуемых образцов и строгого соблюдения условий проведения эксперимента. Эффекты старения, наблюдаемые в критической области, также усложняют экспериментальное исследование систем. Поэтому в настоящее время численные исследования находят широкое применение в теории критических явлений.

При моделировании критической динамики систем методом Монте-Карло возникает ряд принципиальных сложностей. В основном они вызваны явлением критического замедления, характеризующимся аномальным замедлением релаксации системы и корреляции состояний по мере приближения к кри-

тической температуре. Зависимость характерных времен релаксации и корреляции от приведенной температуры имеет степенной характер и определяется динамическим критическим индексом z . Эта проблема еще более существенна для структурно неупорядоченных систем, поскольку их неравновесное критическое поведение характеризуется большими значениями индекса z по сравнению с системами без дефектов.

Влияние слабого замороженного беспорядка на критические явления исследуется в течение многих лет [2]. Согласно критерию Харриса [3], слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в том случае, если коэффициент теплоемкости чистой системы α положителен. В этом случае наблюдается новое универсальное критическое поведение с новыми критическими показателями. В противном случае при $\alpha < 0$ наличие беспорядка несущественно для критического поведения. Условию $\alpha > 0$ удовлетворяют только системы с эффективным гамильтонианом, изоморфным вблизи критической точки модели Изинга. При введении в такие системы любой концентрации слабо коррелированных замороженных дефектов структуры наблюдается принципиальное изменение класса универсальности критического поведения.

Исследования критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков проводились методами ренормгруппы (РГ), численными методами Монте-Карло и экспериментально. Результаты исследований подтверждают существование нового класса универсальности критического поведения разбавленных изингоподобных систем.

Несомненно, является важным то, что выявленные при исследовании двумерной модели Изинга особенности неравновесной критической динамики могут служить основой для адекватной интерпретации экспериментальных данных, полученных для мультислойных структур Fe/Cr и Co/Cr [2].

Целями настоящей диссертации являются

1. Численное исследование влияния дефектов структуры на неравновесную критическую динамику двумерной и трехмерной моделей Изинга, эволюционирующих из различных начальных состояний.
2. Численное исследование эффектов старения на основе анализа двухвременных зависимостей корреляционных функций и функций отклика.
3. Численное исследование нарушений ФДТ, а также расчет предельных значений флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО).
4. Выявление основных подклассов универсальности для неравновесных критических свойств двумерной и трехмерной моделей Изинга в зависимости от начального состояния и степени неупорядоченности системы.

Научная новизна результатов

1. Впервые выявлено, что в структурно неупорядоченных двумерной и трехмерной моделях Изинга, эволюционирующих из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$, вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры наблюдается существенное изменение неравновесных эффектов старения по сравнению с чистой системой.
2. Впервые показано, что при релаксации неупорядоченных систем из низкотемпературного начального состояния наблюдается сильное замедление эффектов корреляции. В результате долговременное поведение автокорреляционной функции описывается соотношениями «сверхстарения», а предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для структурно неупорядоченных систем оказывается равным нулю.
3. Впервые выявлено, что в неравновесном критическом поведении рассмотренных спиновых систем с произвольной начальной намагниченностью m_0 можно выделить пороговые значения $m_0^{(th)}$ с реализацией двух подклассов универсальности, соответствующих эволюции системы из высокотемпературного с $m_0 < m_0^{(th)}$ и низкотемпературного с $m_0 > m_0^{(th)}$ начальных состояний с характерными для этих состояний критическими показателями и значениями предельного ФДО.
4. Впервые для двумерной модели Изинга исследовано проявление логарифмических поправок и кроссоверных явлений перколяционного поведения во временной зависимости намагниченности, а также двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости. С учетом логарифмических поправок вычислены значения критических показателей и предельных значений ФДО.
5. Впервые методами Монте-Карло показано, что неравновесные характеристики трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга демонстрируют принадлежность к подклассам универсальности критического поведения слабо неупорядоченных и сильно неупорядоченных систем, отличных от чистой модели. В случае двумерной модели Изинга неравновесная критическая динамика слабо неупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p \geq 0.9$ относится к классу универсальности «чистой» модели, а неравновесное критическое поведение систем с $p \leq 0.85$ демонстрирует зависимость универсальных характеристик неравновесного критического поведения от концентрации дефектов.

Научная и практическая значимость работы. Разработанные в диссертации методы компьютерного моделирования неравновесного критического поведения чистой и структурно неупорядоченных трехмерной и двумерной моделей Изинга, а также полученные результаты вносят существенный вклад в обоснование и развитие представлений теории критических явлений. Научная ценность проведенных исследований обусловлена построением корректной методики для численного описания неравновесной эволюции моделей Изинга в окрестности критической температуры в условиях их слабого и сильного разбавления немагнитными атомами примеси. Выявленное в результате проведенных расчетов существенное влияние дефектов структуры на неравновесные характеристики критического поведения систем может найти применение при отработке методики и постановке экспериментальных исследований реальных спиновых систем, а также практическом использовании направленной модификации свойств материалов, испытывающих фазовые превращения, за счет их легирования, что служит научной основой для создания материалов с новыми, перспективными физико-химическими свойствами.

Полученные в диссертации результаты вносят существенный вклад в физику фазовых переходов в области исследования критического поведения сложных спиновых систем, характеризующихся аномально медленной динамикой. Детально изучено влияние дефектов структуры и различных начальных состояний на неравновесную критическую динамику двумерной и трехмерной моделей Изинга. Выделены различные подклассы неравновесного критического поведения рассматриваемых систем, что привело к развитию новых представлений теории неравновесных критических явлений.

Личный вклад диссертанта. Разработаны программы для моделирования неравновесной критической динамики структурно неупорядоченной двумерной и трехмерной модели Изинга для случая эволюции систем из различных начальных состояний. Проведены суперкомпьютерные вычисления и обработка полученных массивов данных. Осуществлено вычисление и анализ неравновесных характеристик рассматриваемых систем, выполнено их сравнение с результатами других исследователей.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Методика численного Монте-Карло исследования неравновесного критического поведения двумерной и трехмерной чистой и структурно неупорядоченных моделей Изинга при эволюции из начальных состояний с различными значениями намагниченности.
2. В случае двумерной и трехмерной моделей Изинга с точечными дефектами структуры при эволюции из низкотемпературного начального состояния

вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры наблюдается особое критическое поведение, характеризующее явление «сверхстарения» и равным нулю предельным ФДО.

3. Для трехмерной модели Изинга существует три подкласса универсальности неравновесного критического поведения, соответствующие чистой, слабо неупорядоченной и сильно неупорядоченной системам.
4. Принадлежность слабо неупорядоченной двумерной модели Изинга классу универсальности чистой системы и возникновение кроссоверных явлений перколяционного поведения для систем с сильной неупорядоченностью.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на международных конференциях «Фазовые переходы, критические явления и нелинейные явления в конденсированных средах», Махачкала (2017, 2019 г.г.); International Conference «Computer Simulation in Physics and beyond» 2018, Moscow, Russia; XVII Всероссийской школеконференции молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», Сочи, 2018; Всероссийских научно-практических конференциях «Омские научные чтения», Омск (2017, 2018, 2019 г.г.), а также на научных семинарах кафедры теоретической физики ОмГУ им. Ф.М. Достоевского.

Проведенные исследования были поддержаны грантами РФФИ (No.17-12-00279, 19-32-50006) и грантом Президента РФ МД-6868.2018.2.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 11 печатных изданиях, 10 из которых цитируется в международных базах данных Web of Science и Scopus, 1 – в журнале, рекомендованном ВАК.

Объем и структура работы. Диссертация содержит введение, четыре главы, заключение и список литературы из 118 наименований. Работа представлена на 136 страницах, включает 47 рисунков и 14 таблиц.

Краткое содержание работы

Во **введении** приводится обоснование актуальности диссертационного исследования, формулируются его цели и задачи, обосновывается научная и практическая значимость проведенной работы.

В **первой главе**, носящей обзорный характер, кратко изложены основные концепции и методы, применяемые для исследования критического поведения спиновых систем. Вводится классификация фазовых переходов, определение критической точки и критических показателей. Рассматриваются случаи маргинальных систем, для которых критическое поведение термодинамических

величин модифицируется логарифмическими поправками. В краткой форме изложены основы феноменологической теории скейлинга для равновесных фазовых переходов и особенности критического поведения систем конечных размеров. Рассматривается влияние дефектов структуры на критическое поведение спиновых систем, описываемых моделью Изинга, которая в данной диссертационной работе является объектом исследования. Приводится определение метода Монте-Карло, его базовая реализация и применение к моделированию спиновых систем.

Во **второй главе** представлены результаты исследования маргинального влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга. Выявлено проявление логарифмических поправок и кроссоверных явлений перколяционного поведения в неравновесных характеристиках и критических показателях модели.

В настоящее время большой интерес исследователей вызывает поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой. Это связано с наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения и нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Данные особенности неравновесного поведения наблюдаются в системах при фазовых переходах второго рода, так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации. Эффекты старения проявляются на неравновесном этапе эволюции системы. Они выражаются в существовании двухвременных зависимостей таких функций, как корреляционная функция и функция отклика, зависящих от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t - t_w$. Время ожидания характеризует время, прошедшее 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 замедлением релаксационных процессов с увеличением t_w .

В качестве неравновесных характеристик системы будем рассматривать среднее значение параметра порядка $M(t) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) \rangle]$ и двухвременную корреляционную функцию параметра порядка

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

Линейная функция отклика $R(t, t_w)$ на малое внешнее магнитное поле, прикладываемое к системе в момент t_w и интегральная функция отклика – динамическая восприимчивость $\chi(t, t_w)$, определяются соотношениями

$$R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta \langle S(x, t) \rangle}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0}, \quad \chi(t, t_w) = \int_0^{t_w} dt' R(t, t'). \quad (2)$$

В неравновесном релаксационном процессе выделяется три этапа:

1. Квазиравновесный этап $t - t_w \ll t_w$, $C(t, t_w) = C(t - t_w)$.

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

3. Этап коротковременной динамики $t - t_w \gg t_w \gg 1$,

$$F_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a}, \text{ где } c_a = d/z - a - \theta = d/z - \theta', a = (d - 2 + \eta)/z, \theta = \theta' - (2 - \eta - z).$$

Случай эволюции системы из начального состояния с намагниченностью $m_0 \neq 0$ характеризуется появлением нового временного масштаба $t_m \sim m_0^{-k}$, который определяется начальным значением намагниченности m_0 и показателем $k = 1/[\theta + a + \beta/\nu z]$. Величины $C(t, t_w, t_m)$ и $\chi(t, t_w, t_m)$ являются обобщенно однородными функциями трех временных масштабов $t - t_w$, t_w и t_m и характеризуются следующими скейлинговыми зависимостями [1]:

$$\begin{aligned} C(t, t_w, t_m) &= a_C(t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\theta-1} \tilde{F}_C(t_w/t, t/t_m), \\ R(t, t_w, t_m) &= a_R(t - t_w)^{a-d/z} (t/t_w)^{\theta} \tilde{F}_R(t_w/t, t/t_m), \\ \chi(t, t_w, t_m) &= a_\chi(t - t_w)^{a+1-d/z} (t/t_w)^{\theta-1} \tilde{F}_\chi(t_w/t, t/t_m). \end{aligned} \quad (3)$$

Согласно общим представлениям о процессе релаксации, при $t > t_w \gg t_{eq}(T_s)$, где T_s – конечная температура системы, справедливы зависимости $C(t, t_w) = C^{eq}(t - t_w)$ и $R(t, t_w) = R^{eq}(t - t_w)$, где C^{eq} и R^{eq} – соответствующие равновесные величины, связанные флуктуационно-диссипативной теоремой (ФДТ): $R^{eq}(t) = -\frac{1}{T_s} \frac{dC^{eq}(t)}{dt}$. При неравновесном поведении систем обобщение ФДТ принимает вид:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T_s} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (4)$$

фактор $X(t, t_w)$ называется флуктуационно-диссипативным отношением (ФДО) и является мерой нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы. Для времен $t > t_w \gg t_{rel}$ ФДТ устанавливает, что $X(t, t_w) = 1$. Однако в общем случае на временах $t, t_w \ll t_{rel}$ $X(t, t_w) \neq 1$. Предельное значение ФДО

$$X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w), \quad (5)$$

является важной величиной в описании систем с медленной динамикой.

Присутствие в системе точечных некоррелированных дефектов структуры изменяет ее критическое поведение, если критический показатель теплоемкости чистой системы $\alpha > 0$. Примером системы с $\alpha > 0$ является трехмерная модель Изинга. Двумерная модель Изинга является маргинальным случаем с

$\alpha = 0$. Теория критических явлений предсказывает для маргинальных случаев появление логарифмических поправок в асимптотическом поведении термодинамических и корреляционных функций при сохранении значений критических индексов чистой модели. В работе [4] для слабо неупорядоченной двумерной модели Изинга со случайными связями было показано, что теплоемкость C_V и корреляционная длина ξ вблизи критической точки характеризуются зависимостями:

$$C_V \sim \ln |\ln |\tau||, \quad \xi \sim |\tau|^{-1} [1 + g \ln(1/|\tau|)]^{1/2} \quad (6)$$

с $g = 4.8(1 - p)/p$, где $\tau = (T - T_c)/T_c$ – приведенная температура, а параметр p определяет спиновую концентрацию системы. В работе [5] для той же модели в температурном поведении корреляционной длины предсказывалось появление степенной логарифмической поправки вида $\xi \sim |\tau|^{-1} \ln^{1/2} |\tau|$, а также поправок для магнитной восприимчивости и намагниченности, определяемых в критической области их связью с корреляционной длиной: $\chi \sim \xi^{7/4}$, $M \sim \xi^{-1/8}$.

Гамильтониан структурно неупорядоченной ферромагнитной модели Изинга с учетом внешнего магнитного поля h задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j - h \sum_i p_i S_i, \quad (7)$$

где p_i – множитель, равный 1, если в узле находится спин, и 0, если узел занят немагнитным атомом дефекта, $S_i = \pm 1$ – значение спина в узле i , $J > 0$ – интеграл обменного взаимодействия. Дефекты структуры распределялись в системе в соответствии с функцией распределения $P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(p_i)$, где $p = \langle p_i \rangle$ задает величину спиновой концентрации в системе. Моделирование проводилось на квадратной решетке с линейным размером $L = 1024$ в широком интервале изменения спиновых концентраций с $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.85, 0.8, 0.75$ и 0.7 при соответствующих критических температурах $T_c(p)$: $T_c(1.0) = 2.26918$, $T_c(0.95) = 2.08989(8)$, $T_c(0.9) = 1.9032(5)$, $T_c(0.85) = 1.7098(4)$, $T_c(0.8) = 1.5103(4)$, $T_c(0.75) = 1.2980(10)$ и $T_c(0.7) = 1.0729(10)$ [6, 7].

Было проведено вычисление временных зависимостей динамической корреляционной длины $\xi(t)$ при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0$. В качестве единицы времени выбирается шаг Монте-Карло на спин (MCS/s), который соответствует возможности переворота общего числа спинов N в узлах решетки. Зависимости $\xi(t)$ асимптотически стремятся к значению $\xi(\infty) = L/2 = 512$, что связано с наложенными на систему периодическими граничными условиями. Для характеристики поведения корреляционной длины на долговременном этапе с $t \gg 1$ были вычислены временные зависимости параметра $\Delta\xi(t) = \xi(\infty) - \xi(t)$.

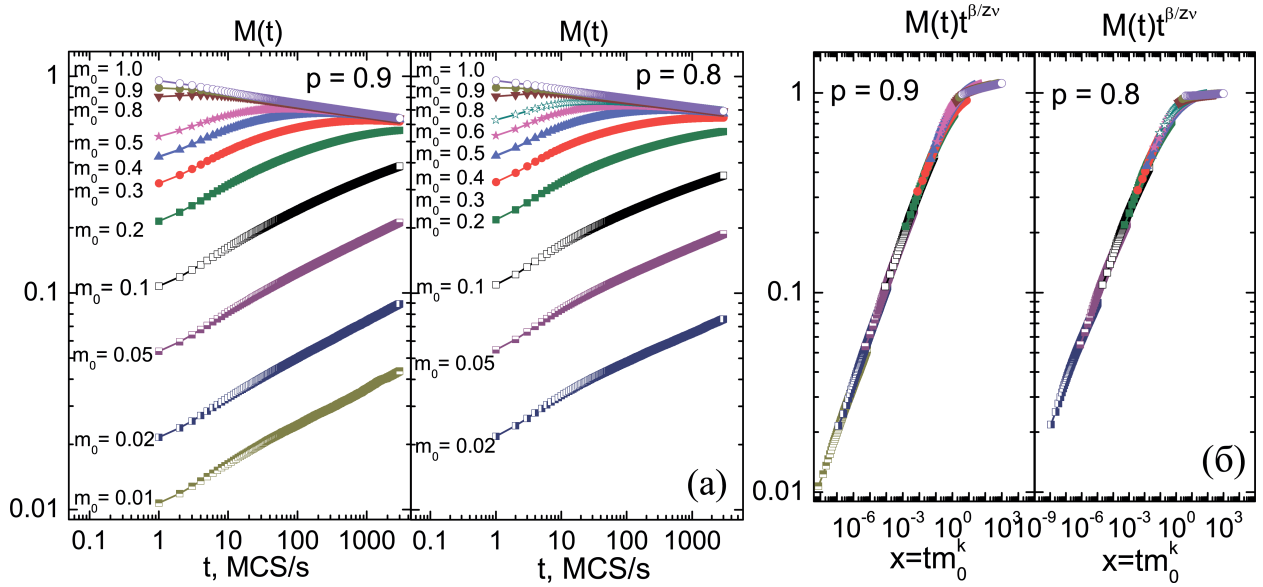


Рис. 1: Временная зависимость намагниченности $M(t)$ (а) и ее скейлинговой функции $F_m(t/t_m) = M(t, t_m)t^{\beta/z\nu}$ (б) для различных m_0 в двумерной модели Изинга с $p = 0.9$ и $p = 0.8$.

Для чистой системы поведение корреляционной длины характеризуется временной зависимостью параметра $\Delta\xi$ в виде

$$\Delta\xi(t) \sim t^{-1/z}. \quad (8)$$

В случае слабо неупорядоченных систем с $p = 0.95$ и $p = 0.9$ в связи с малостью значений времени t до выхода корреляционной длины $\xi(t)$ на плато влиянием логарифмических поправок на ее поведение можно пренебречь. Следовательно, для данных систем справедлива зависимость $\Delta\xi(t)$ в виде (8). Из найденных зависимостей $\Delta\xi(t)$ в соответствии с (8) были вычислены величины показателя $1/z$ и соответствующие значения индекса $z(p)$: $z(1.0) = 2.174(40)$, $z(0.95) = 2.160(82)$, $z(0.9) = 2.173(58)$. Для сильно неупорядоченных систем с $p < 0.9$ влияние дефектов на временное поведение корреляционной длины характеризуется логарифмической поправкой вида: $\Delta\xi(t) \sim t^{-1/z}(\ln t)^{1/2}$. С учетом поправки данного вида были определены следующие значения показателей $z(p)$: $z(0.8) = 2.441(26)$, $z(0.75) = 2.756(43)$, $z(0.7) = 3.190(48)$.

Также был осуществлен расчет временной зависимости намагниченности $M(t) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x, t) \rangle]$ при эволюции систем из различных начальных состояний. Вблизи критической точки намагниченность является обобщенно однородной функцией времени наблюдения t и временного масштаба $t_m \sim m_0^{-k}$. В результате предсказывается реализация временной зависимости для намагниченности вида

$$M(t, t_m) = A_m t^{-\beta/z\nu} F_m(t/t_m), \quad (9)$$

где $F_m(t/t_m) = F_m(tm_0^k)$ – скейлинговая функция. $M(t, t_m)$ характеризуется возрастающей степенной зависимостью $M(t) \simeq m_0 t^{\theta'}$ в случае высокотемпе-

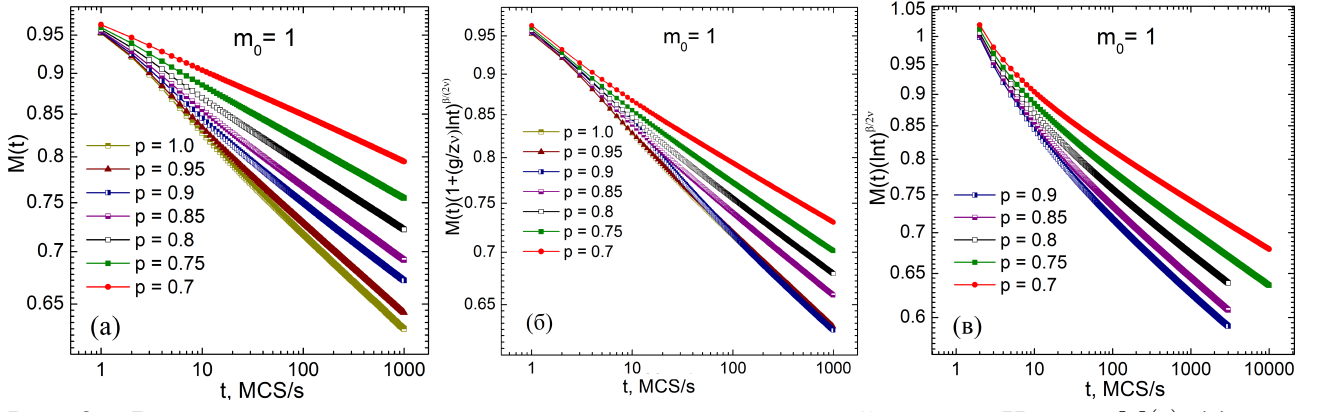


Рис. 2: Временная зависимость намагниченности двумерной модели Изинга $M(t)$ (а) при релаксации из начального состояния с $m_0 = 1$ и с учетом влияния логарифмических поправок в виде $M(t)(1 + (g/z\nu) \ln t)^{\beta/2\nu}$ (б) и $M(t)(\ln t)^{\beta/2\nu}$ (в).

ратурного начального состояния с намагниченностью $m_0 \ll 1$ и убывающей степенной зависимостью $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$ для низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$. Влияние начальных состояний на критическую релаксацию намагниченности двумерной модели Изинга демонстрируется на рис. 1 (а) для систем с $p = 0.9$ и $p = 0.8$. Видны существенные как качественные, так и количественные отличия в релаксации намагниченности из начальных состояний с $m_0 \ll 1$, $m_0 = 1$ и случаев с $0.1 \leq m_0 \leq 0.8$. Так, релаксационные кривые для систем с $m_0 \neq 1$ асимптотически приближаются к кривой с начальным состоянием $m_0 = 1$. На временах $t < t_{cr} = t_m \sim m_0^{-k}$ наблюдается рост намагниченности $M(t) \simeq m_0 t^{\theta'}$, а при $t > t_{cr} = t_m$ ее спад $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$. Для системы с $m_0 = 1$ наблюдается только зависимость $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$.

На рис. 1 (б) представлены результаты численной проверки скейлинговой зависимости (9) для намагниченности $M(t, t_m)$ как функции начальных значений m_0 для систем с $p = 0.9$ и $p = 0.8$. Для скейлинговой функции $F_m(x)$ от $x = t m_0^k$ наблюдается «коллапс» данных, полученных для различных m_0 , на единой универсальной кривой, соответствующей той или иной спиновой концентрации p , с линейным начальным участком (в двойном логарифмическом масштабе) с $F_m(x) \sim x^{1/k}$. На рис. 2 (б, в) демонстрируется процедура учета логарифмических поправок к описанию временной зависимости намагниченности при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ и использованием коррекции в форме $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu} (1 + \frac{g}{z\nu} \ln t)^{-\beta/2\nu}$ для слабо неупорядоченных систем с $p = 0.95$, $p = 0.9$ и $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu} (\ln t)^{-\beta/2\nu}$ для сильно неупорядоченных систем с $p < 0.9$. Из анализа временной зависимости намагниченности были вычислены значения показателя $z(p)$: $z(0.95) = 2.161(12)$, $z(0.9) = 2.158(13)$, $z(0.85) = 2.293(15)$, $z(0.8) = 2.508(17)$, $z(0.75) = 2.774(21)$, $z(0.7) = 3.217(25)$, которые в пределах погрешности совпадают со значениями, вычисленными из поведения корреляционной длины. Таким образом, для

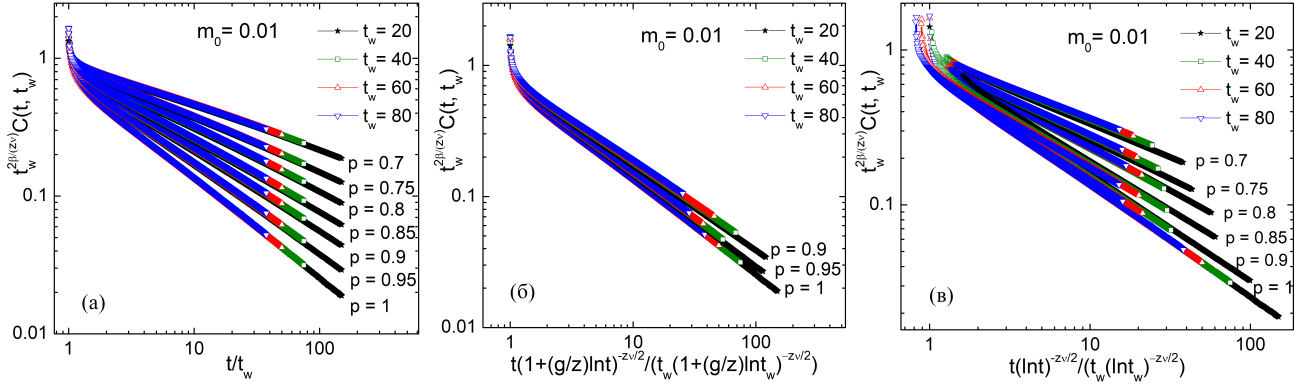


Рис. 3: Зависимости скейлинговых функций $F_C(t/t_w) = t_w^{2\beta/(z\nu)} C(t, t_w)$ от t/t_w (а) и с учетом логарифмических поправок в виде $F_C(t(1+(g/z)\ln t)^{-z\nu/2}/(t_w(1+(g/z)\ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для системы $p = 0.95$ (б) и в виде $F_C(t(\ln t)^{-z\nu/2}/(t_w(\ln t_w)^{-z\nu/2}))$ для систем с $p \leq 0.9$ (в) при эволюции из начального состояния с $m_0 = 0.01$.

систем с $p \geq 0.9$ значения z являются постоянными и критическая динамика структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга принадлежит к классу универсальности чистой модели с показателем $z = 2.174(40)$. В то же время, вблизи порога спиновой перколяции $p_c^{(s)} = 0.5927$ (для систем с $p \leq 0.85$) критический индекс z демонстрирует зависимость от концентрации дефектов $z = A|\ln(p - p_c^{(s)})| + B$, которая характеризуется нарушением стандартной формы динамического скейлинга вследствие кроссоверных эффектов перколяционного поведения [8]. Также выявлено, что показатели $1/k$ и θ' характеризуются аналогичной логарифмической зависимостью от спиновой концентрации.

Обобщенная восприимчивость $\chi(t, t_w)$ рассчитывалась в виде интегральной функции отклика (термостатической восприимчивости) [1]:

$$\chi(t, t_w) = \frac{1}{T_c N} \sum_i [\langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \rangle], \quad \Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)], \quad (10)$$

где функция $\Delta S_i(t_w)$ вычисляется при моделировании состояний системы от начального момента времени $t = 0$ до времени ожидания t_w , $S_i^W(s) = \text{th}(J \sum_{j \neq i} p_j S_j / T)$. Чтобы найти ФДО, нужно выразить $T_c \chi(t, t_w)$ как функцию $C(t, t_w)$ и вычислить значение

$$X(t_w) = \lim_{C \rightarrow 0} T_c \frac{\partial \chi(t, t_w)}{\partial C(t, t_w)}. \quad (11)$$

К полученным значениям $X(t_w)$ затем применяется линейная аппроксимация и экстраполяция $X(t_w \rightarrow \infty)$, которая позволяет определить предельные значения ФДО X^∞ .

Был проведен расчет двухвременных зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ для высокотемпературного начального состояния с намагниченностью $m_0 = 0.01 \ll 1$ и низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$. Эффекты старения в поведении

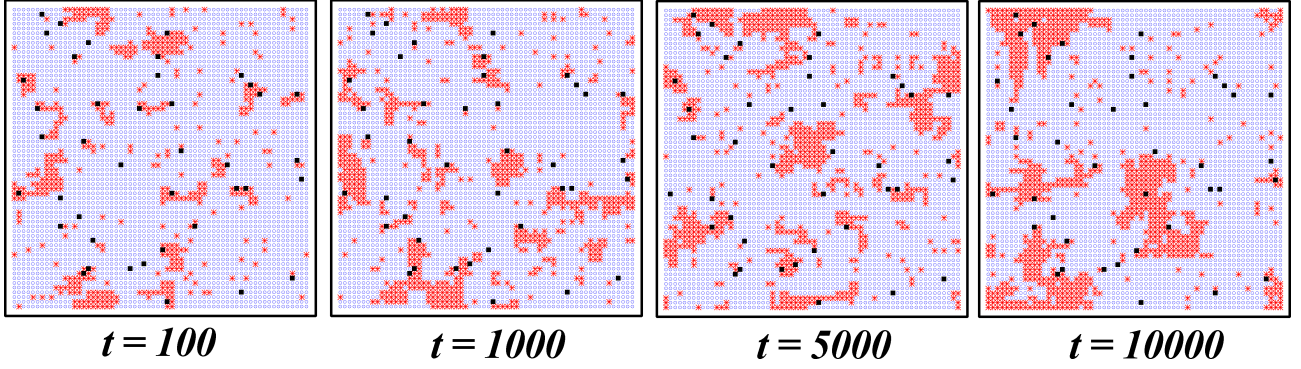


Рис. 4: Визуализация неравновесного процесса пиннинга доменных стенок на дефектах структуры для $p = 0.99$ в различные моменты времени t . Синие кружки и красные звездочки – спины со значением $S_i = +1$ и $S_i = -1$ соответственно, черные квадратики – дефекты структуры.

$C(t, t_w)$ и $\chi(t, t_w)$ характеризуются замедлением корреляции и релаксации системы с увеличением t_w в соответствии со скейлинговыми формами

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/z\nu} F_C(\xi(t)/\xi(t_w)), \quad \chi(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/z\nu} F_\chi(\xi(t)/\xi(t_w)). \quad (12)$$

При эволюции из высокотемпературного начального состояния для чистой системы скейлинговые функции $F_{C,\chi}$ убывают на долговременном этапе $t - t_w \gg t_w$ по степенному закону $F_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_{a,\chi}}$ с показателями $c_a = c_\chi = d/z - \theta'$ (рис. 3 (а)). Для структурно неупорядоченных систем с учетом вида логарифмических поправок показатели $c_{a,\chi}$ определялись из асимптотического наклона представленных на рис. 3 (б, в) графиков скейлинговых функций $F_{C,\chi}$ на временном интервале с $t/t_w \gg 1$ от переменных $t(1 + (g/z) \ln t)^{-z\nu/2} / (t_w(1 + (g/z) \ln t_w)^{-z\nu/2})$ для системы с $p = 0.95$ и от $t \ln^{-z\nu/2} t / (t_w \ln^{-z\nu/2} t_w)$ для систем с $p \leq 0.9$. Значения показателей $c_{a,\chi}(p)$, вычисленные с учетом логарифмических поправок для слабо неупорядоченных систем с $p \geq 0.9$, в пределах погрешности совпадают между собой и со значениями чистой модели $c_{a,\chi}(1.0) = 0.732(5)$. Для спиновых концентраций $p < 0.85$ зависимость $c_{a,\chi}(p)$ хорошо описывается логарифмической зависимостью $c_{a,\chi}(p) = A_{a,\chi} |\ln(p - p_c)| + B_{a,\chi}$, отражающей влияние кроссоверных эффектов перколяционного поведения [8].

При эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ для чистой системы долговременное поведение скейлинговых функций $F_{C,\chi}$ в (12) характеризуются убывающей степенной зависимостью вида

$$F_{C,\chi} \sim (t/t_w)^{-\phi}, \quad \phi = 1 + \beta(\delta + 2)/(\nu z), \quad (13)$$

где $\phi \simeq 1.98$. Для структурно неупорядоченных систем наблюдается пиннинг доменных стенок на дефектах структуры, процесс которого демонстрирует представленная на рис. 4 визуализация состояний системы с $p = 0.99$ в различные моменты времени t . В момент $t = 0$ все спины ориентированы вверх. Затем вокруг дефектов структуры возникают кластеры спинов, ориентированных вниз. На более поздних временах происходит их огрубление – процесс роста

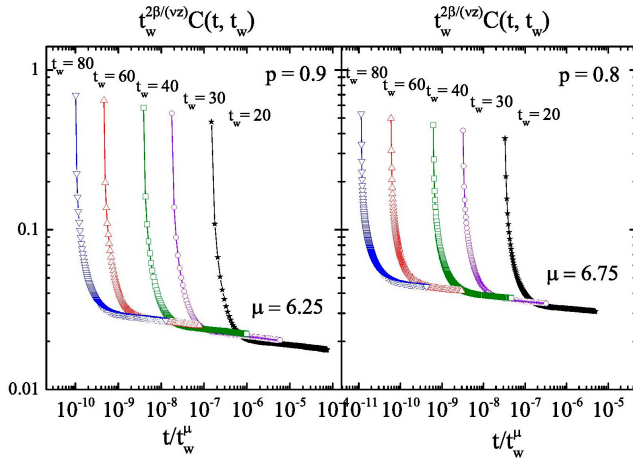


Рис. 5: Эффект «сверхстарения» в скейлинговом поведении автокорреляционной функции $t_w^{2\beta/(\nu z)} C(t, t_w)$ в зависимости от (t/t_w^μ) .

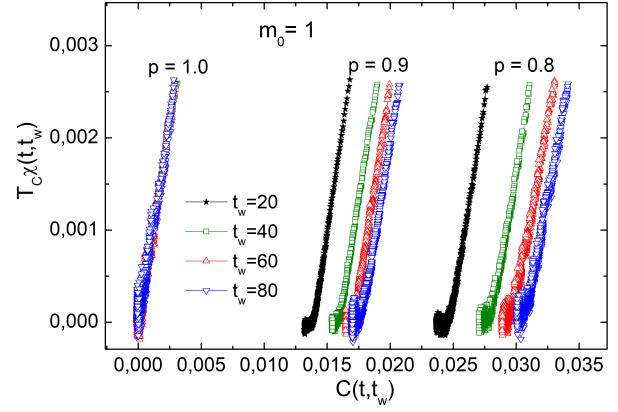


Рис. 6: Зависимости восприимчивости от автокорреляционной функции, определяющие ФДО при эволюции из начального состояния с $m_0 = 1$.

и объединения малых кластеров в более крупные. Вследствие пиннинга доменных стенок в поведении автокорреляционной функции на долговременном этапе с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ наблюдается нарушение скейлинговой зависимости, определяемой $F_C(t/t_w)$. Представление зависимости в виде $\tilde{F}_C(t/t_w^\mu)$ позволяет при значениях показателя $\mu(p = 0.95) = 6.10(5)$, $\mu(p = 0.9) = 6.25(5)$, $\mu(p = 0.85) = 6.50(5)$, $\mu(p = 0.8) = 6.75(5)$, $\mu(p = 0.75) = 7.05(5)$, $\mu(p = 0.7) = 7.50(5)$ получать совпадение данных для различных t_w в долговременном режиме с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ (рис. 5). Случай скейлинговой зависимости, характеризуемой показателем $\mu > 1$, классифицируется в теории неравновесных процессов как явление «сверхстарения» [2]. Таким образом, для структурно неупорядоченных систем реализуется более сложная, чем в (12) форма для скейлинговой зависимости автокорреляционной функции вида

$$C(t, t_w) = A_C(t - t_w)^{a+1-d/z} \left[(t/t_w)^{\theta-1} F_C(t/t_w) + B_C(p) \tilde{F}_C(t/t_w^\mu) \right], \quad (14)$$

где $F_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-2\beta/(\nu z)}$, $\tilde{F}_C(t/t_w^\mu) \sim (t/t_w^\mu)^{-\beta/(\nu z)}$ и $B_C(p = 1) = 0$.

Для получения предельных значений ФДО была проведена процедура определения величин $X(t_w)$ на основе соотношения (11). В случае высокотемпературного начального состояния предельное значение ФДО для чистой модели Изинга $X_{HT}^\infty = 0.339(19)$ находится в очень хорошем согласии с результатом $X_{HT}^\infty = 0.33(1)$, полученным в работе [1]. Для слабо неупорядоченных ($p = 0.95$ и $p = 0.9$) систем предельное значение ФДО в пределах погрешности совпадает со значением для чистой модели, следовательно, эти системы относятся к одному классу универсальности. Для сильно неупорядоченных систем предельное ФДО начинает зависеть от концентрации дефектов, что связано с влиянием кроссоверных эффектов перколяционного поведения [8].

При эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ для структурно неупорядоченных систем за счет пиннинга доменных стенок на дефектах проявляется наличие двух линейных участков: первый участок соответствует изменению автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ на временах $t - t_w \sim t_w \gg 1$, а второй – долговременному этапу эволюции $t - t_w \gg t_w \gg 1$ (рис. 6). Первые участки характеризуется наклоном $X(p = 0.95) = 0.750(34)$, $X(p = 0.9) = 0.748(35)$, $X(p = 0.8) = 0.714(36)$ и $X(p = 0.7) = 0.669(32)$, близким к среднеполевым значениям предельного ФДО $X_{LT}^\infty = 0.75$ [1], тогда как вторым участкам соответствует $X_{LT}^\infty = 0$.

В третьей главе представлены результаты численного исследования методами Монте-Карло неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга. Рассматриваются случаи чистой и структурно неупорядоченных систем, эволюционирующих из высокотемпературного начального состояния с приведенной намагниченностью $m_0 \ll 1$ и низкотемпературного полностью упорядоченного начального состояния с $m_0 = 1$.

Для расчета характеристик неравновесного критического поведения был реализован динамический процесс односпиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани [2]. Проводилось моделирование систем со спиновыми концентрациями $p = 1.0, 0.95, 0.8, 0.6$ и 0.5 на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ и наложенными периодическими граничными условиями при соответствующих критических температурах [9, 10].

При исследовании эволюции системы из *высокотемпературного* начального состояния формировались начальные состояния со значениями намагниченности $m_0 = 0.02$ для «чистой» системы с $p = 1.0$, $m_0 = 0.01$ для системы с $p = 0.8$ и $m_0 = 0.005$ в случае $p = 0.6$. Временные зависимости $C(t, t_w)$ и $R(t, t_w)$ для различных значений времени ожидания t_w и спиновых концентраций p демонстрируют проявление эффектов старения – замедления процессов релаксации и корреляции в системе в соответствии со скейлинговыми формами:

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} F_C(t/t_w), \quad R(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)-1} F_R(t/t_w). \quad (15)$$

На долговременном этапе с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ скейлинговые функции $F_{C,R}(t, t_w)$ характеризуются степенными зависимостями, определяемыми показателями c_a и c_r :

$$F_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a}, \quad F_R(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_r}. \quad (16)$$

Для каждой отдельно взятой спиновой концентрации значения c_a и c_r находятся в очень хорошем согласии друг с другом и с теоретически предсказываемым значением $c_a = c_r = d/z - \theta'$.

Было проведено исследование нарушений ФДТ и вычисление предельных значений ФДО, значения которых для высокотемпературного начального

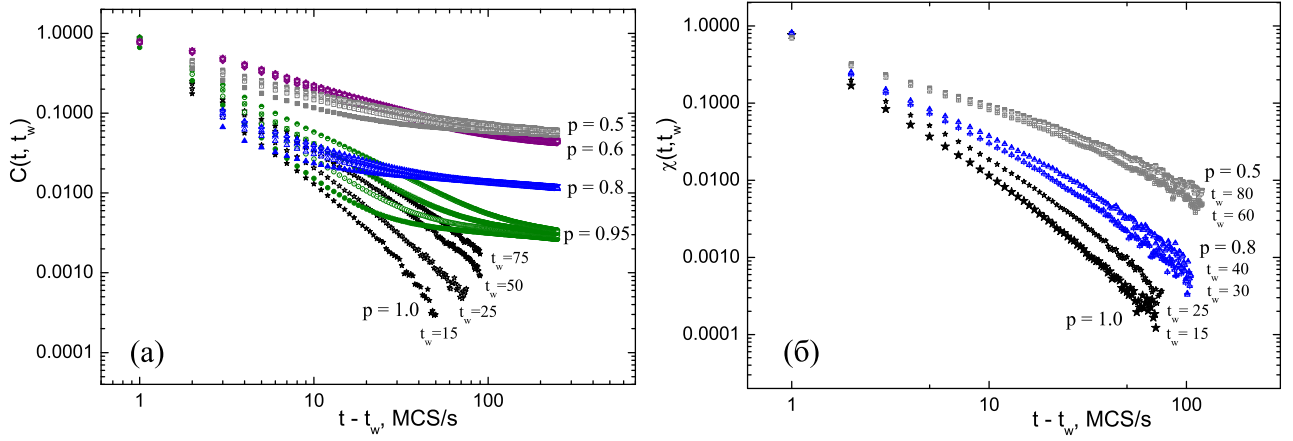


Рис. 7: Неравновесные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ (а) и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ (б) для систем с концентрациями спинов p при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$.

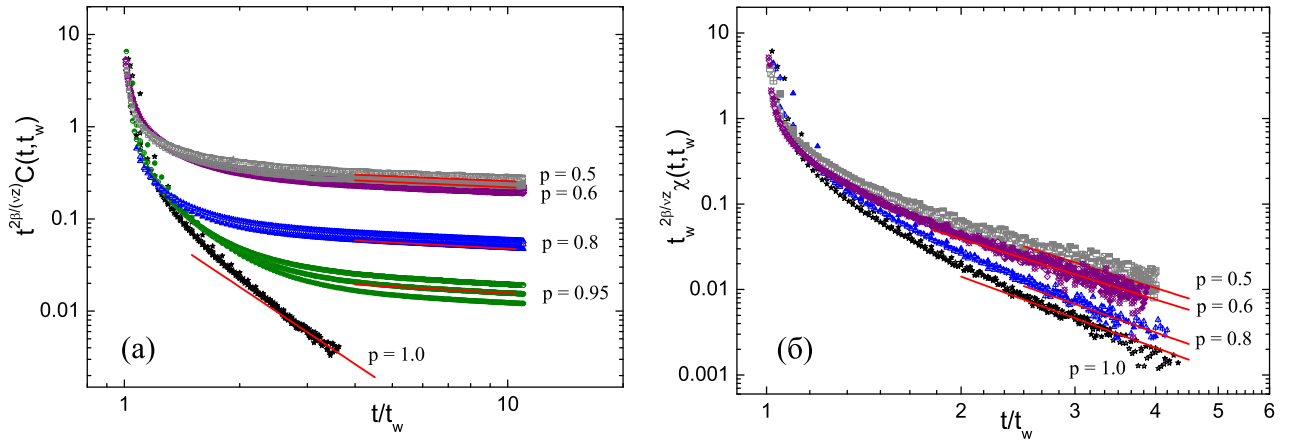


Рис. 8: Скейлинговые зависимости $t_w^{2\beta/(\nu z)} C(t, t_w)$ (а) и $t_w^{2\beta/(\nu z)} \chi(t, t_w)$ от $(t - t_w)/t_w$ (б), демонстрирующие «коллапс» полученных для различных t_w данных при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$.

состояния оказываются равными $X_{HT}^\infty(p = 1.0) = 0.380(13)$, $X_{HT}^\infty(p = 0.8) = 0.413(11)$ и $X_{HT}^\infty(p = 0.6) = 0.446(8)$.

В случае эволюции системы из *низкотемпературного* начального состояния с $m_0 = 1$ осуществлялся расчет двухвременных зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ (1) и динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ (10). Полученные временные зависимости представлены на рис. 7.

На этапе старения, реализующемся для времен $t - t_w \sim t_w$, предсказывается зависимость автокорреляционной функции и восприимчивости в виде

$$C(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} F_C(t/t_w), \quad \chi(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} F_\chi(t/t_w). \quad (17)$$

Скейлинговые функции $F_{C,\chi}$ убывают на долговременном этапе $t - t_w \gg t_w$ по степенному закону $F_{C,\chi} \sim (t/t_w)^{-\phi}$ с показателем $\phi = 1 + \beta(\delta + 2)/(\nu z)$.

Для подтверждения соотношений (17) были построены зависимости $t_w^{2\beta/(\nu z)} C(t, t_w)$ и $t_w^{2\beta/(\nu z)} \chi(t, t_w)$ от t/t_w , показанные на рис. 8 и демонстрирующие «коллапс» полученных данных для различных t_w на соответствующих различным спиновым концентрациям p универсальных кривых. Для временных

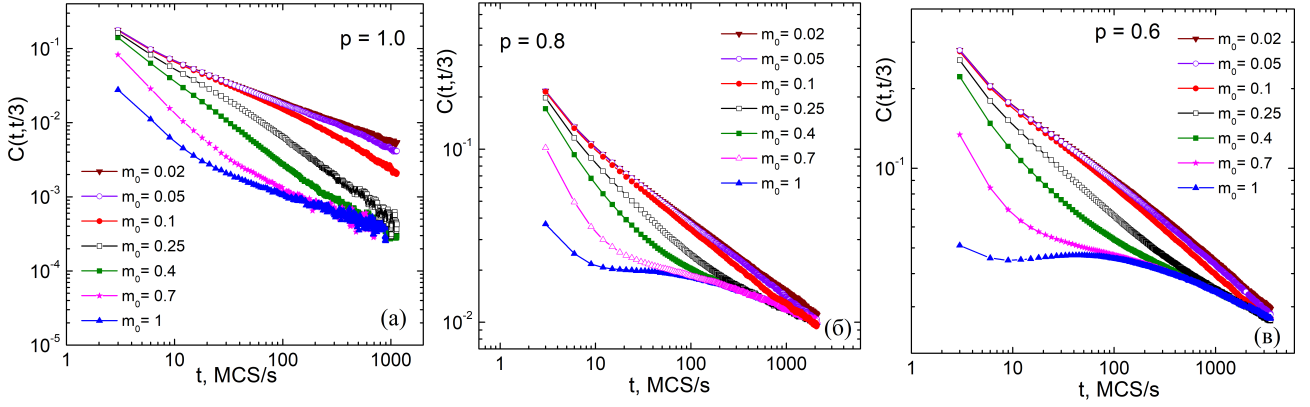


Рис. 9: Неравновесные зависимости автокорреляционной функции $C(t, t/3)$ от времени наблюдения t для трехмерной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 1.0$ (а), $p = 0.8$ (б) и $p = 0.6$ (в) при эволюции из различных начальных состояний.

интервалов $t - t_w \gg t_w$ были определены значения показателей ϕ_C и ϕ_χ , которые в пределах погрешности совпадают между собой и с теоретически с предсказанным значением ϕ .

Для структурно неупорядоченных систем наблюдается сильное замедление убывания корреляционных функций по сравнению с «чистой» системой. Эта особенность связана с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры, происходящем при неравновесном изменении доменной структуры системы при переходе от однодоменного начального состояния к многодоменной флуктуационной структуре, возникающей при критической температуре T_c . Как следствие, в поведении автокорреляционной функции наблюдаются эффекты «сверхстарения», характеризующиеся реализацией скейлинговой зависимости вида (14) с показателем $\mu = 2.30(6)$ для систем с $p = 0.95, 0.8$ и $\mu = 2.80(7)$ для систем с $p = 0.6, 0.5$.

Результаты исследования нарушений ФДТ показывают, что для «чистой» системы зависимость $T_c \chi$ от C имеет линейный характер для временного интервала $t - t_w \gg t_w \gg 1$ и характеризуется предельным значением ФДО $X_{LT}^\infty = 0.786(5)$. Для структурно неупорядоченных систем при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ предельные значения ФДО X_{LT}^∞ оказываются равными нулю.

В четвертой главе представлены результаты исследования влияния различных начальных значений намагниченности m_0 на характеристики неравновесного критического поведения двумерной и трехмерной моделей Изинга. Для выявления зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости от значений m_0 удобно в качестве времени ожидания выбрать величину, пропорциональную времени наблюдения, например $t_w = t/3$, тогда скейлинговые формы для $C(t, t_w, t_m)$ и $\chi(t, t_w, t_m)$ примут вид [1]:

$$C(t, t/3, t_m) = t^{-2\beta/z\nu} G_C(t m_0^k), \quad \chi(t, t/3, t_m) = t^{-2\beta/z\nu} G_\chi(t m_0^k), \quad (18)$$

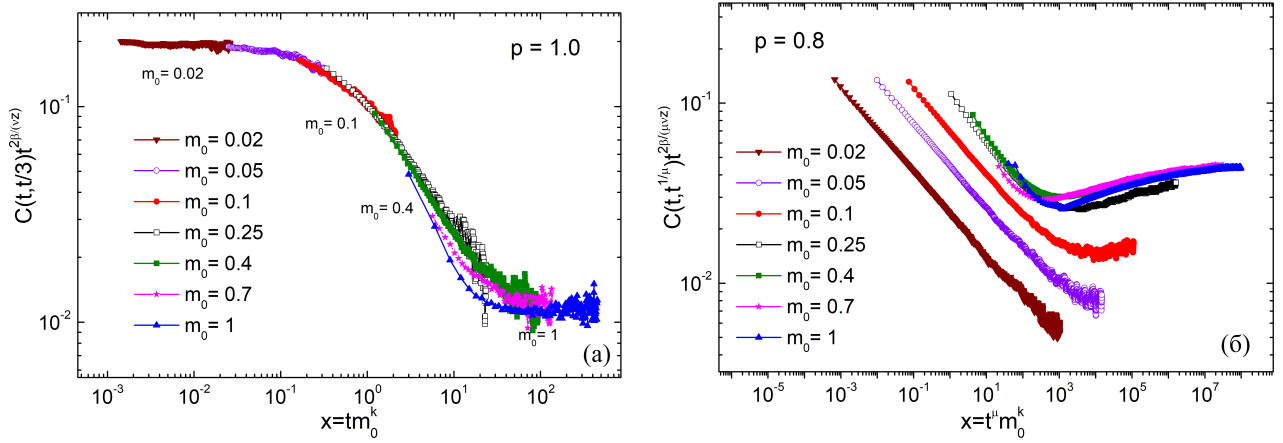


Рис. 10: Зависимость скейлинговой функции $G_C(t m_0^k) = C(t, t_w = t/3, t_m) t^{2\beta/(vz)}$ от переменной $x = t m_0^k$ для чистой трехмерной модели Изинга (а) и эффекты «сверхстарения», наблюдаемые в зависимости скейлинговой функции $G_C(t^\mu m_0^k) = C(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) t^{2\beta/(\mu v z)}$ от $x = t^\mu m_0^k$ для неупорядоченной системы с $p = 0.8$ (б).

где $G_{C,\chi}(t/t_m) = G_{C,\chi}(t m_0^k)$ – скейлинговые функции.

На рис. 9 представлены графики временных зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w = t/3, t_m)$ для *трехмерной* модели Изинга с концентрациями спинов $p = 1.0, 0.8$ и 0.6 для различных начальных состояний. Эффекты старения проявляются через отклонение зависимостей автокорреляционной функции $C(t, t_w = t/3, t_m)$ от степенной, имеющей вид прямой в двойном логарифмическом масштабе. С ростом значения m_0 эффекты старения усиливаются, причем в структурно неупорядоченных системах это явление более ярко выражено по сравнению с чистой моделью Изинга за счет пиннинга доменных стенок на дефектах структуры. Для проверки осуществления скейлинговых соотношений (18) были построены зависимости $t^{2\beta/(vz)} C(t, t_w = t/3, t_m)$ от $x = t m_0^k$, представленные на рис. 10 (а) для системы с $p = 1.0$ и демонстрирующие коллапс данных для различных значений начальной намагниченности m_0 на единой кривой. В неупорядоченных системах для автокорреляционной функции реализуется скейлинговая зависимость вида

$$C(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) = t^{-\frac{2\beta}{\mu v z}} \tilde{G}_C(t^\mu m_0^k), \quad (19)$$

показанная на рис. 10 (б) для системы с $p = 0.8$. Показатель μ равен $\mu = 2.30(6)$ для систем с $p = 0.95, 0.8$ и $\mu = 2.80(7)$ для систем с $p = 0.6, 0.5$, что соответствует явлению «сверхстарения». Наблюдаемое для начальных состояний с $0.25 \leq m_0 \leq 1$ изменение режима поведения автокорреляционной функции на долговременном этапе с $t \gg t_w$ связано с сильным замедлением эффектов корреляции вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. Поведение автокорреляционной функции трехмерной модели Изинга, релаксирующей из начальных состояний с m_0 в интервале $0.25 \leq m_0 \leq 1$, описывается для чистой системы соотношениями теории канонического старения, а для структурно неупорядо-

ченной модели Изинга – теории сверхстарения. В случае начальных состояний с $m_0 < 0.1$ автокорреляционная функция описывается скейлинговыми формами, соответствующими каноническому старению, для систем со всеми значениями спиновых концентраций.

Временная зависимость динамической восприимчивости $\chi(t, t_w, t_m)$ для слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга с $p = 0.95, 0.8$, как и в случае чистой модели, описывается скейлинговым соотношением (18). Для сильно неупорядоченных систем $\chi(t, t_w, t_m)$ характеризуется скейлинговой зависимостью вида $\chi(t, t_w = t^{1/\mu}, t_m) = t^{-\frac{2\beta}{\mu z \nu}} \tilde{G}_\chi(t^\mu m_0^k)$, соответствующей явлению «сверхстарения».

В случае *двумерной* модели Изинга в поведении автокорреляционной функции $C(t, t_w = t/3, t_m)$ и восприимчивости $\chi(t, t_w = t/3, t_m)$ для структурно неупорядоченных систем с $p < 1$ при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ наблюдается нефизический рост автокорреляционных функций, который объясняется необходимостью учета логарифмических поправок. Введение временных поправок в виде зависимости $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ от времени наблюдения t для системы с $p = 0.95$ и $(\ln t)^{-(z\nu c_a)/2} C(t, t/3)$ от t для $p \leq 0.9$ позволяет устранить такое нефизическое поведение автокорреляционной функции.

Автокорреляционная функция чистой двумерной модели Изинга с $p = 1.0$ описывается скейлинговым соотношением (18) с учетом канонического старения. В структурно неупорядоченных системах реализуется скейлинговая зависимость вида (19), учитывающая соотношения «сверхстарения», с показателем $\mu(p = 0.95) = 6.10(5)$; $\mu(p = 0.9) = 6.25(5)$; $\mu(p = 0.85) = 6.50(5)$; $\mu(p = 0.8) = 6.75(5)$; $\mu(p = 0.75) = 7.05(5)$; $\mu(p = 0.7) = 7.50(5)$. В случае начальных состояний с намагниченностью $0.5 \leq m_0 \leq 1$ временная зависимость автокорреляционной функции для чистой системы описывается соотношениями теории канонического старения с $\mu = 1$, а для структурно неупорядоченных систем – соотношениями теории сверхстарения с $\mu > 1$. Если $m_0 < 0.4$, автокорреляционная функция описывается скейлинговыми формами, соответствующими каноническому старению с $\mu = 1$ как для чистой системы, так и для структурно неупорядоченных систем.

Для вычисления предельных значений ФДО был осуществлен расчет временных зависимостей динамической восприимчивости $\chi(t, t_w, t_m)$ и автокорреляционной функции $C(t, t_w, t_m)$ для различных значений m_0 при времени ожидания равным $t_w = t/9$, которое лучше соответствует условию $t - t_w \gg t_w$ для долговременного этапа эволюции системы.

Для *трехмерной* модели Изинга предельное ФДО X^∞ вычислялось в соответствии с соотношением (11) через параметрическую зависимость $T_c \chi$ от C .

В случае начальных состояний с намагниченностью $0.02 \leq m_0 \leq 0.1$ системы со всеми спиновыми концентрациями характеризуются линейной зависимостью $T_c \chi$ от C и предельными значениями ФДО, которые в пределах погрешности совпадают со значениями, вычисленными для высокотемпературного начального состояния. В случае $0.25 \leq m_0 \leq 1$ предельное значение ФДО для чистой системы ($p = 1.0$) хорошо согласуется со значением $X_{LT}^\infty = 0.784(5)$ для низкотемпературного состояния с $m_0 = 1$. Для структурно неупорядоченных систем с начальными намагниченностями $0.25 \leq m_0 \leq 1$ предельное ФДО $X^\infty = 0$, что связано с сильным замедлением корреляционных эффектов на временах $t \gg t_w \gg 1$ вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры.

Для структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга с учетом логарифмических поправок значения ФДО определялись через параметрическую зависимость $T_c (1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu_{ca})/2} \chi(t, t/9, t_m)$ от $(1 + (g/z) \ln t)^{-(z\nu_{ca})/2} C(t, t/9, t_m)$ для систем со спиновыми концентрациями $0.9 < p < 1.0$ и $T_c (\ln t)^{-(z\nu_{ca})/2} \chi(t, t/9, t_m)$ от $(\ln t)^{-(z\nu_{ca})/2} C(t, t/9, t_m)$ для систем с $p \leq 0.9$. В случае начальных состояний с намагниченностью $0.01 \leq m_0 < 0.4$ системы со всеми спиновыми концентрациями характеризуются линейной зависимостью $T_c \chi$ от C и предельными значениями ФДО, которые в пределах погрешности совпадают со значениями для высокотемпературного начального состояния $X_{HT}^\infty(p = 1.0) = 0.339(19)$, $X_{HT}^\infty(p = 0.9) = 0.317(21)$, $X_{HT}^\infty(p = 0.8) = 0.256(23)$ и $X_{HT}^\infty(p = 0.7) = 0.175(18)$. Для начальных состояний с $0.5 \leq m_0 \leq 1$ предельное значение ФДО для системы с $p = 1.0$ хорошо согласуется со значением $X_{LT}^\infty = 0.751(24)$ для низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$. Для структурно неупорядоченных систем с $0.5 \leq m_0 \leq 1$ предельное ФДО $X^\infty = 0$, что связано с замедлением корреляционных эффектов на временах $t \gg t_w$ вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры.

В **заключении** диссертации приведены основные результаты исследования, которые состоят в следующем:

1. Проведено численное Монте-Карло исследование неравновесной критической динамики трехмерной и двумерной моделей Изинга в широком интервале изменения спиновых концентраций при эволюции систем из различных начальных состояний. Реализовано с использованием алгоритма тепловой бани численное исследование эффектов старения в данных системах посредством выявления различных режимов временной зависимости автокорреляционной функции и функции отклика от значений времени ожидания. Проведено исследование нарушений ФДТ и осуществлен расчет предельных значений ФДО при эволюции из различных начальных состояний.

2. Выявлено, что в структурно неупорядоченной двумерной и трехмерной моделях Изинга, эволюционирующих из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$, наблюдается существенное изменение неравновесных эффектов старения по сравнению с чистой системой вследствие пиннинга доменных стенок на дефектах структуры.
3. Показано, что при эволюции из низкотемпературного начального состояния в неупорядоченных системах наблюдается пиннинг доменных стенок на структурных дефектах, приводящий к сильному замедлению спада автокорреляционной функции с реализацией соотношений «сверхстарения». Вследствие этого для таких систем предельные значения ФДО X^∞ равны нулю.
4. Выявлено, что в неравновесном критическом поведении двумерной и трехмерной моделей Изинга с произвольной начальной намагниченностью m_0 существуют пороговые значения $m_0^{(th)}$ с реализацией двух подклассов универсальности, соответствующих эволюции системы из высокотемпературного с $m_0 < m_0^{(th)}$ и низкотемпературного с $m_0 > m_0^{(th)}$ начальных состояний с характерными для этих состояний критическими показателями и значениями предельного ФДО.
5. Для структурно неупорядоченной двумерной модели Изинга исследовано проявление логарифмических поправок и кроссоверных явлений перколяционного поведения во временной зависимости намагниченности, двухвременной зависимости автокорреляционной функции и динамической восприимчивости. С учетом влияния логарифмических поправок вычислены значения критических показателей и предельные значения ФДО.
6. Методами Монте-Карло показано, что неравновесное критическое поведение трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга демонстрирует принадлежность к классам универсальности слабо неупорядоченных и сильно неупорядоченных систем с характеристиками, отличными от чистой модели. В случае двумерной модели Изинга неравновесная критическая динамика слабо неупорядоченных систем со спиновыми концентрациями $p \geq 0.9$ относится к классу универсальности «чистой» модели с совпадающими критическими показателями и значениями предельного ФДО, а неравновесное критическое поведение систем с $p \leq 0.85$ демонстрирует зависимость характеристик неравновесного критического поведения от концентрации дефектов.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

1. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, P.N. Malyarenko, A.N. Vakilov. Aging and non-equilibrium critical phenomena in Monte Carlo simulations of 3D pure and diluted Ising models // Progress of Theoretical and Experimental Physics. — 2015. — Vol. 215. Issue 5. 053A01. — P. 1–20.
2. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н. Эффекты старения и памяти в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченных магнетиков при эволюции из низкотемпературного начального состояния // Письма в ЖЭТФ. — 2015. — Т. 102, вып. 3. — С. 192–201.
3. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Pospelov E.A., Malyarenko P.N. Peculiarities of non-equilibrium critical behavior of 3D diluted Ising model with evolution from low-temperature initial state // Material Science Forum. — 2016. — Vol. 845. — P. 85–88.
4. Krizhanovskiy V.V., Malyarenko P.N., Prudnikov V.V., Prudnikov P.V. Features of the non-equilibrium critical dynamics in 3D pure and diluted Ising-like ferromagnets // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. — 2016. — Vol. 9. No. 4. — P. 463–468.
5. Прудников В.В., Прудников П.В., Маляренко П.Н. Исследование влияния различных начальных состояний и дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 152. № 6(12). — С. 1293–1308.
6. Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Маляренко П.Н. Эффекты сверхстарения и перколяционного кроссовера в неравновесном критическом поведении двумерной неупорядоченной модели Изинга // Письма в ЖЭТФ. — 2018. — Т. 107. № 9. — С. 595–603.
7. Прудников В.В., Прудников П.В., Маляренко П.Н. Монте-Карло-исследование влияния начальных состояний и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Изинга // ФТТ. — 2018. — Т. 60. № 6. — С. 1086–1098.
8. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, P.N. Malyarenko. Influence of initial states and structure defects on non-equilibrium critical behavior of 3D and 2D Ising models // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — Vol. 1163. — 012005.
9. P.N. Malyarenko, V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov. Peculiarities of non-equilibrium critical behavior of site-diluted 2D Ising model // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — Vol. 1163. — 012016.

10. Прудников В.В., Прудников П.В., Маляренко П.Н., Щур Л.Н. Исследование маргинального влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга // ЖЭТФ. — 2020. — Т. 157. Вып. 2. — С. 308–326.
11. Прудников В.В., Прудников П.В., Маляренко П.Н., Щур Л.Н. Расчет логарифмических поправок для корреляционной длины и их проявление в неравновесном критическом поведении автокорреляционной функции для неупорядоченной двумерной модели Изинга // Вестник Омского университета. — 2019. — Т. 24. Вып. 4. — С. 16–24 (из списка ВАК).

Список литературы

- [1] Calabrese P., Gambassi A., Krzakala F. Critical ageing of Ising ferromagnets relaxing from an ordered state // J. Stat. Mech. — 2006. — P06016.
- [2] Прудников В.В., Прудников П.В., Мамонова М.В. Особенности неравновесного критического поведения модельных статистических систем и методы их описания // УФН. — 2017. — Т. 187, № 8. — С. 762–797.
- [3] Harris A. B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1974. — V. 7 № 9. — 1671.
- [4] Доценко Вик. С., Доценко Вл. С. Фазовый переход в 2D модели Изинга с примесными связями // Письма в ЖЭТФ. — 1981. — Т. 33, вып. 1. — С. 40–44.
- [5] Шалаев Б. Н. Корреляционная функция и восприимчивость двумерной модели Изинга с примесями // ФТТ. — 1984. — Т. 26. С. 1811–1823.
- [6] Shchur L. N., Vasilyev O. A. Critical amplitude ratio of the susceptibility in the random-site two-dimensional Ising model // Phys. Rev. E. — 2001. — Vol. 65. — P. 016107.
- [7] Martins P.H.L., Plascak J.A. Universality class of the two-dimensional site-diluted Ising model // Phys. Rev. E. — 2007. — Vol. 76, Iss. 1 — P. 012102.
- [8] Марков О. Н, Прудников В. В. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных двумерных изинговских систем // Письма в ЖЭТФ. — 1994. — Т. 60., вып. 1. — С. 24–29.
- [9] Ferrenberg A.M., Landau D.P. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study // Phys. Rev. B. — 2001. — V. 44, Iss. 10. — P. 5081–5091.
- [10] Прудников В. В., Прудников П. В., Вакилов А.Н., Криницын А.С. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга // ЖЭТФ. — 2007. — Т. 132, Вып. 2 (8). — С. 417–425.