

Вакилов Андрей Николаевич

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

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Омск - 2019

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»
Научный консультант: Прудников Владимир Васильевич, профессор, доктор физико-математических наук.

Официальные оппоненты:

Аплеснин Сергей Степанович, профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики ФГБОУ ВО «Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева»

Вахитов Роберт Минисламович, профессор, доктор физико-математических наук, заведующего кафедрой теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»

Овчинников Александр Сергеевич, профессор, доктор физико-математических наук, профессора кафедры теоретической и математической физики ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Ведущая организация: Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН.

Защита диссертации состоится 27 марта 2020 года в 14-00 на заседании диссертационного совета Д212.296.03 в Челябинском государственном университете по адресу: 454001, Челябинск, ул.Братьев Кашириных,129,ЧелГУ, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Челябинского государственного университета.

Автореферат разослан 2020г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д212.296.03
доктор физ.-мат.наук, профессор

Е.А.Беленков

Общая характеристика работы

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, 2]. Наблюдаемые по мере приближения к точке фазового перехода аномально большие по амплитуде и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных характеризуются эффективно сильным взаимодействием. 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 [3, 4], что присутствие случайно распределенных замороженных примесей изменяет свойства системы вблизи критической точки, если теплоемкость системы расходится в критической точке с индексом $\alpha > 0$. 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 разбавленных изингоподобных магнетиков к настоящему моменту посвящено значительное число работ [5–7]. 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. 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 ре-

лаксации 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 [8, 9]. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризующимися 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 [10], 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 равновесного 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 конечно-размерного 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 влияние 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 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. 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 присутствии 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:

- развитие 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 отличию 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 исследовании динамики систем.

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 относятся 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 значении 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 "Куровка" (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 Simulation 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.

Содержание работы.

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 структурно неупорядоченных систем.

Во **второй главе** представлены результаты численного исследования критического поведения структурно неупорядоченных изинговских магнетиков 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 [11], 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. 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

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j \quad (1)$$

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

$$P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(1 - p_i) \quad (2)$$

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 $p = 0.95; 0.80; 0.60; 0.50$. Для снижения влияния эффектов критического замедления и корреляции различных спиновых конфигураций в работе был применен наиболее эффективный 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:

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

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

$$\Phi = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left| \sum_i p_i \sigma_i \exp\left(\frac{2\pi i x_{n,i}}{L}\right) \right|^2, \quad (4)$$

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 $L = 20$ до $L = 300$. 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 [12, 13] 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. В данной работе был применен метод, предложенный в работе [11] 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 некоторой термодинамической величины A_L , определенной на конечной решетке, в отсутствие внешнего магнитного поля может быть представлена в критической области в виде

$$A_L(\tau) = L^{\delta/\nu} f_A(s_L(\tau)), s_L = L/\xi_L(\tau), \quad (5)$$

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

$$L^{\delta/\nu} = A(\tau) s_L^{\delta/\nu}(\tau), \quad (6)$$

В результате (5) может быть записано в виде

$$A_L(\tau) = A(\tau) F_A(s_L(\tau)), \quad (7)$$

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

$$F_A(s_L(\tau)) = s_L^{\delta/\nu}(\tau) f_A(s_L(\tau)) \quad (8)$$

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

$$A(\tau) = A_L(\tau) / Q_A(x_L(\tau)), \quad (9)$$

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

$$Q_A(x_L(\tau)) = F_A(f_\xi^{-1}(x_L(\tau))), \quad (10)$$

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 [11], выбирались скейлинговые функции для восприимчивости и корреляционной длины как в виде полиномиальной зависимости от x , так и от $\exp(-1/x)$:

$$Q_A(x) = 1 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4, \quad (11)$$

$$Q_A(x) = 1 + c_1e^{-1/x} + c_2e^{-2/x} + c_3e^{-3/x} + c_4e^{-4/x}, \quad (12)$$

с подбираемыми по методу наименьших квадратов коэффициентами c_n для каждой температуры T .

На рис.1 - 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 .

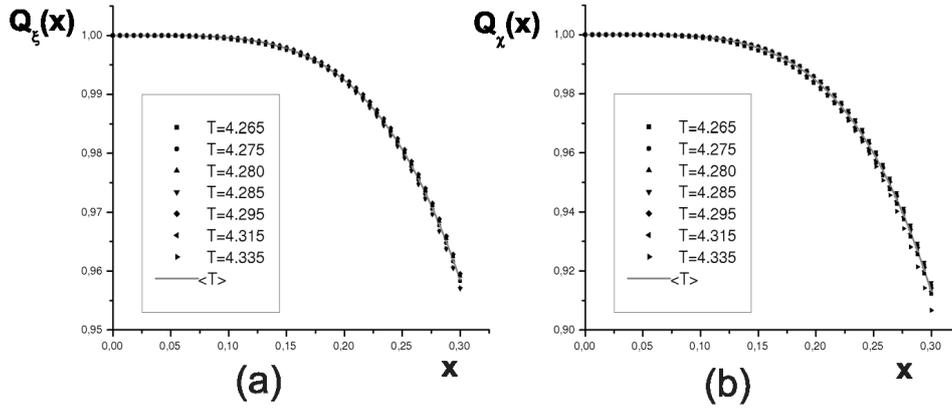


Рисунок 1 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации

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:

$$\xi(\tau) = \tau^{-\nu}(A_0^\xi + A_1^\xi \tau^\theta), \theta = \omega\nu, \quad (13)$$

$$\chi(\tau) = \tau^{-\gamma}(A_0^\chi + A_1^\chi \tau^\theta), \theta = \omega\nu, \quad (14)$$

и провели расчет значений критических индексов ν, γ и θ , а также критических температур, используя метод наименьших квадратов для наилучшей аппроксимации данных. 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. Полученные результаты показывают, 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

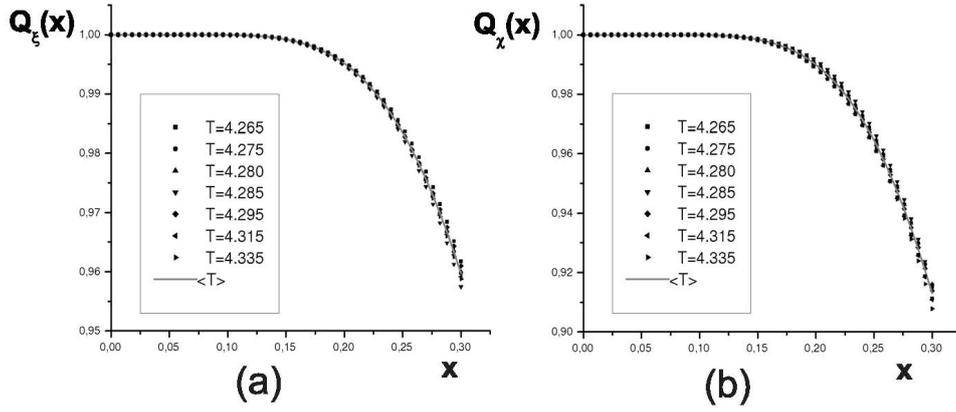


Рисунок 2 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.95$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

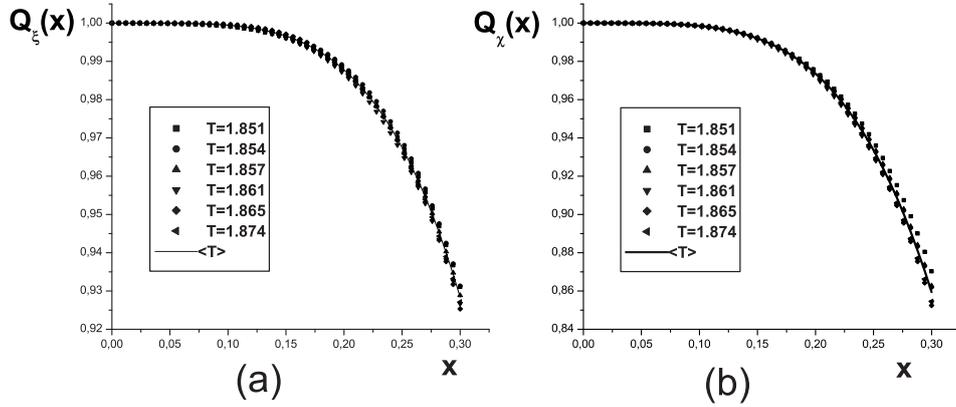


Рисунок 3 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.5$ с использованием полиномиальной от x аппроксимации

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.

В этой же главе определены нули статистической суммы (нули Фишера), которые определяются соотношением $Z(\beta) = Z(\eta + i\xi) = 0$, где Z - статистическая сумма, $\beta = 1/T$. 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 [16], используя соотношения $Re(u_c - u)$ and $Im(u) \sim aL^{-1/\nu}$ определили критический индекс корреляционной длины ν трехмерной модели Изинга. Статистическая сумма определяется выражением

$$Z(\beta) = \sum_{S_i} \exp(-\beta E) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-\beta E), \quad (15)$$

где $p(E, \beta)$ плотность состояний. Комплексные нули статистической суммы указывают сингулярное поведение свободной энергии. Рассматривая статистическую сумму, как функцию комплекс-

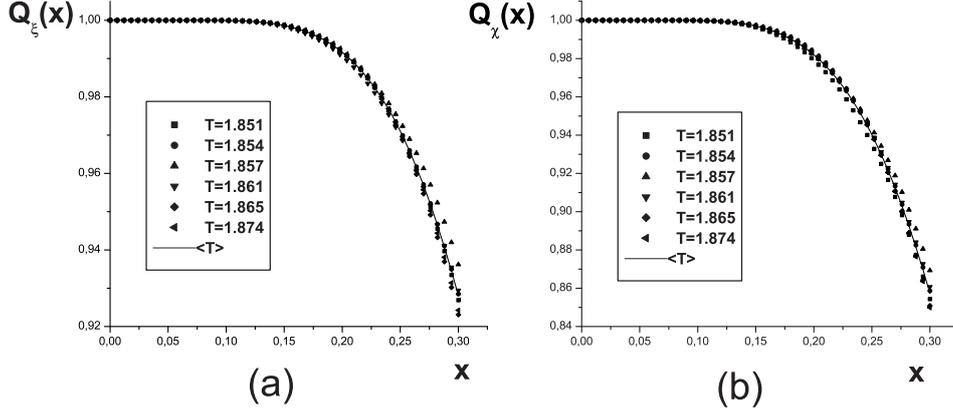


Рисунок 4 Скейлинговые функции для корреляционной длины (а) и восприимчивости (б), полученные при различных температурах для системы с $p = 0.5$ с использованием полиномиальной от $\exp(-1/x)$ аппроксимации

ной температуры $\beta = \eta + i\xi$ [14].

$$Z(\beta) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta + i\xi)E) = \sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta E) [\cos(\xi E) - i \sin(\xi E)]) \quad (16)$$

Определяя величину R пропорциональную $Z[Re(\beta)]$ в виде [16]:

$$R = \frac{Z(\beta)}{Z[Re(\beta)]} = \frac{\sum_E p(E, \beta) \exp(-(\eta + i\xi)E)}{\sum_E p(E, \beta) \exp(-\eta E)} = \langle \cos(\xi E) \rangle_\eta - i \langle \sin(\xi E) \rangle_\eta, \quad (17)$$

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 [15, 16]:

$$\langle \cos(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \cos(\xi E) H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}{\sum_E H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}, \quad (18)$$

$$\langle \sin(\xi E) \rangle_\eta = \frac{\sum_E \sin(\xi E) H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}{\sum_E H_{\beta_c}(E) \exp((\beta_c - \eta)E)}, \quad (19)$$

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) .

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 конфигурациям. Так как, нас интересует поведение систем вблизи критической температуры моделирование осуществлялось при β_c , которые мы определили в данной главе ($\beta_c(0.95) = 0.2345947(2)$, $\beta_c(0.8) = 0.285757(2)$, $\beta_c(0.6) = 0.412519(3)$ и $\beta_c(0.5) = 0.541979(3)$). 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:

$$Re(u_c - u), Im(u) \sim aL^{-1/\nu}(1 + bL^{-\omega}), \quad (20)$$

где ω -индекс поправки к скейлингу, определенный в данной главе $\omega(0.95), \omega(0.8) = 0.23(13)$ и $\omega(0.6), \omega(0.5) = 0.28(15)$. 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 неупорядоченных трехмерных изинговских магнетиков.

В **третьей главе** представлены результаты компьютерного моделирования методом параллельного отжига низкотемпературного поведения неупорядоченного антиферромагнетика со случайными полями. Рассматривается та же, что и в [17, 18], антиферромагнитная модель Изинга с концентрацией спинов $p = 0, 5$, соответствующей области сильного неупорядочения. Стояла получить подтверждение существования для подобной системы спин-стекольного основного состояния и сложной доменной структуры путем реализации и применения для ее численного исследования алгоритма метода параллельного отжига, разработанного специально для изучения термодинамики спиновых стекол. 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:

$$H = J_1 \sum_{i,j} p_i p_j \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{i,k} p_i p_k \sigma_i \sigma_k + h \sum_i \sigma_i, \quad (21)$$

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

$$M = \frac{1}{pL^3} [\langle \sum_i \sigma_i \rangle], \quad (22)$$

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

$$q_{\alpha,\beta} = \frac{1}{pL^3} [\sum_i \langle p_i \sigma_i \rangle_{(\alpha)} \langle p_i \sigma_i \rangle_{(\beta)}], \quad (23)$$

где индексы α, β характеризуют различные реплики неупорядоченной системы, моделируемые одновременно при одной и той же температуре и отличающиеся различными начальными конфигурациями. В выражениях (22), (23) 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.

Метод параллельного отжига является расширением обычного алгоритма Метрополиса. 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-стеклольному 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. В качестве оптимального ряда температур можно воспользоваться геометрической прогрессией $T_{\alpha+1}/T_\alpha = \text{const}$:

$$T_\alpha = T_0 R^\alpha \quad (\alpha = 0 \dots N), \quad (24)$$

где $R = \sqrt[N]{T_N/T_0}$. 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. 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 :

$$(E(\beta'_\alpha) - E(\beta'_{\alpha+1})) (\beta'_{\alpha+1} - \beta'_\alpha) \simeq \text{const} \quad (25)$$

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.

Нами рассматривалась антиферромагнитная модель Изинга с концентрацией спинов $p = 0.5$, соответствующей области сильного неупорядочения, и напряженностью магнитного поля $h = 2$. Моделирование проводилось для широкого набора значений линейных размеров кубической решетки $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

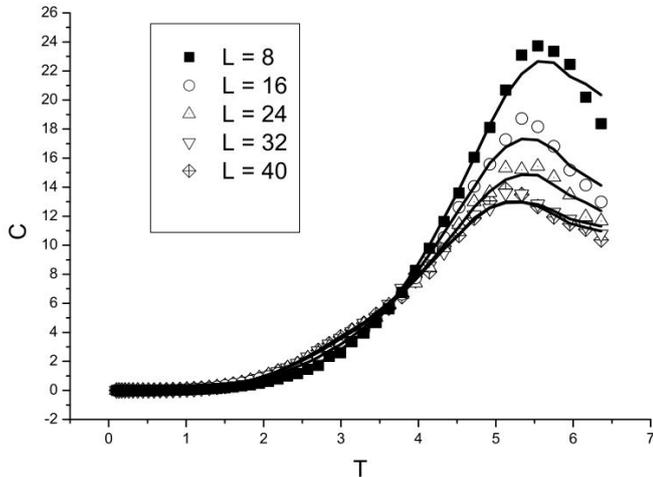


Рисунок 5 Температурная зависимость теплоемкости C для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

Для определения температуры фазового перехода в системе и интервалов существования различных фазовых состояний было рассчитано температурное поведение теплоемкости (рис. 5) 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 [19].

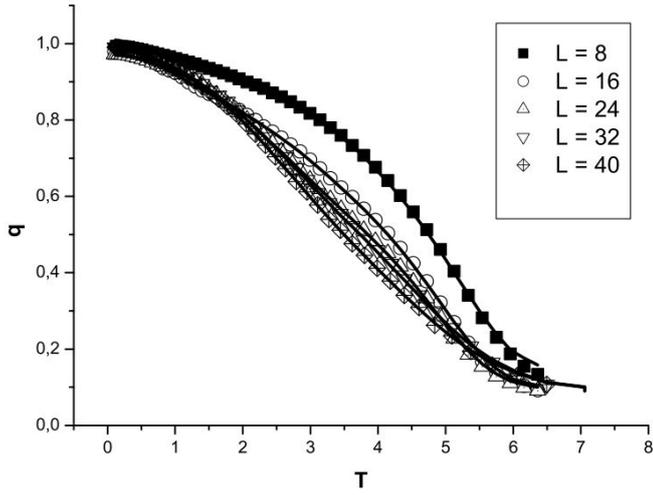


Рисунок 6 Температурная зависимость спин-стекольного параметра порядка q для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $L = 8, 16, 24, 32, 40$.

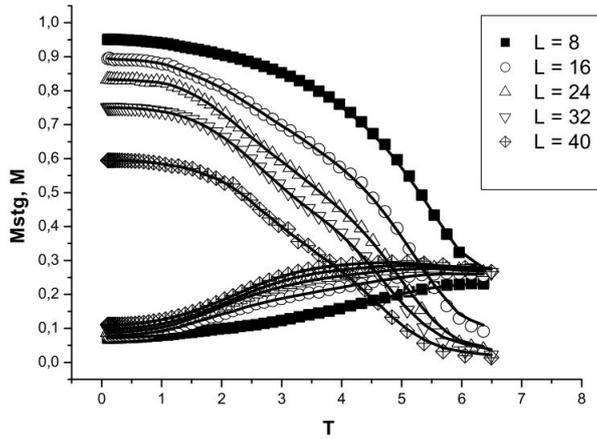


Рисунок 7 Температурная зависимость шахматной M_{stg} и полной M намагниченностей для систем со спиновой концентрацией $p = 0.50$ и линейными размерами $l = 8, 16, 24, 32, 40$.

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 равновесных начальных конфигураций. Полученные начальные состояния использовались при реализации метода параллельных температур. В рамках этого метода выбирался первоначальный набор температур по формуле (24). 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 рис. 6 – 7 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 антиферромагнитной 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.

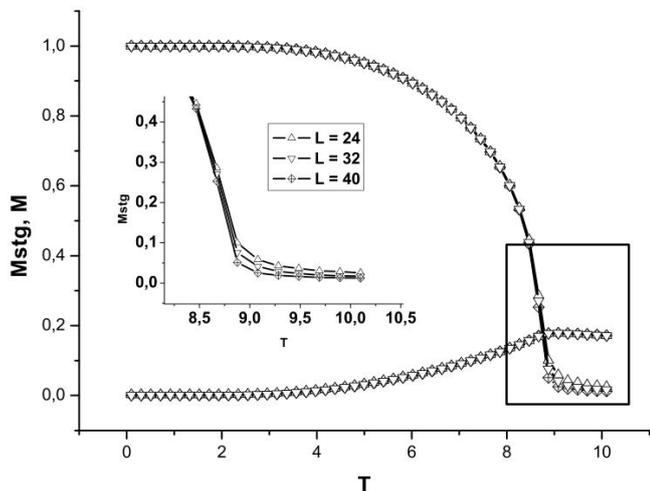


Рисунок 8 Температурная зависимость «шахматной» M_{stg} и полной M намагниченностей для систем со спиновой концентрацией $p = 0.90$ и линейными размерами $L = 24, 32, 40$. На вставке для M_{stg} выделена температурная область фазового перехода.

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 рис. 8 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 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 $L = 40$. Анализ данных полученных 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.

Таким образом, в результате применения численного метода параллельного 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.

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 [20], 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.

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 промежуточных времени t_b и $t_{b'}$, но истечении которых их намагниченности m_b и $m_{b'}$ достигнут одного и того же значения m_1 , позволяет получить динамический индекс z из соотношения

$$\frac{t_b}{t_{b'}} = \left(\frac{b}{b'}\right)^z \quad \text{или} \quad z = \frac{\ln(t_b/t_{b'})}{\ln(b/b')} \quad (26)$$

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

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 $m_b(t)$. Было выполнено моделирование систем с концентрацией 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 .

Для независимого определения значений индекса z лучше использовать соотношение (26). Однако выявленный степенной характер релаксации намагниченности при критической температуре позволил использовать следующую процедуру обработки кривых для перенормированных намагниченностей $m_b(t)$. Кривые $m_b(t)$, построенные в двойном логарифмическом масштабе, аппроксимировались прямыми $\lg m_b = k_b \lg t + n_b$ по методу 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

$$z = \frac{n_{b'} - n_b}{k_{av} \lg(b/b')}. \quad (27)$$

На основе соотношения (27) были получены наборы значений индекса z_b , соответствующих различным b при $b' = 1$. Выделенная тенденция зависимости z от b позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай $b \rightarrow \infty$, предполагающую зависимость

$$z_b = z_{b=\infty} + \text{const } b^{-1}. \quad (28)$$

В результате при $L = 48$ были получены следующие значения: для однородной системы $z(1.0) = 1.97 \pm 0.08$, для примесных систем $z(0.95) = 2.19 \pm 0.07$, $z(0.8) = 2.20 \pm 0.08$, $z(0.6) = 2.58 \pm 0.09$, $z(0.4) = 2.65 \pm 0.12$. Соответственно для $L = 144$: $z(0.95) = 2.19 \pm 0.07$, $z(0.8) = 2.29 \pm 0.06$, $z(0.6) = 2.72 \pm 0.08$, и $z(0.5) = 2.75 \pm 0.08$. 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 однородной системы полученные значения условно могут быть разделены на три группы, значительно отличающиеся по величине. 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 связывающий 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 [22]. 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 [21–23], 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 [3] 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 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 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 однородных систем, вычисленных в трехпетлевом приближении, а также полученных при численном моделировании методами Монте-Карло. Обсуждаются эффекты влияния примеси на критическое поведение двумерных систем. Рассматриваемая модель представ-

ляет собой классическую спиновую систему с замороженными в узлах решетки немагнитными атомами примеси, описываемую гамильтонианом

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

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 (2)

Данная модель термодинамически эквивалентна $O(m)$ -симметричной модели Гинзбурга-Ландау-Вильсона, определяемой эффективным гамильтонианом:

$$H[\varphi, V] = \int d^d x \left(\frac{1}{2} [|\nabla \vec{\varphi}|^2 + r_0 \vec{\varphi}^2 + V(x) \vec{\varphi}^2] + \frac{g_0}{4!} \vec{\varphi}^4 \right), \quad (29)$$

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 [26].

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

$$\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} = -\lambda_0 \frac{\delta H}{\delta \vec{\varphi}} + \vec{\eta} + \lambda_0 \vec{h}, \quad (30)$$

где λ_0 — кинетический коэффициент; $\vec{\eta}(x, t)$ — гауссова случайная сила, характеризующая влияние теплового резервуара и задаваемая функцией распределения:

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

нормировочной константой \mathbf{A}_η ; $\vec{h}(t)$ — внешнее поле, термодинамически сопряженное параметру порядка. Временная корреляционная функция $\mathbf{G}(x, t)$ параметра порядка определяется путем решения уравнения (30) с $\vec{H}[\varphi, V]$, задаваемым (29), 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 [25], что критическая динамическая модель, основанная на уравнении типа Ланжевена, полностью эквивалентна стандартной лагранжевой системе [24] 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 применения к критической динамике разбавленных магнетиков с замороженными точечными примесями и протяженными дефектами в рамках ε -разложения изложены в работе [21].

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. Определим перенормированный параметр порядка как $\varphi = Z^{-1/2} \varphi_0$. Тогда перенормированные вершинные функции будут иметь обобщенный вид:

$$\Gamma^{(n)}(q, \omega; r, g, \delta, \lambda, \mu) = Z^{n/2} \Gamma_0^{(n)}(q, \omega; r_0, g_0, \delta_0, \lambda_0) \quad (31)$$

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

$$\begin{aligned} g_0 &= \mu^{4-d} Z_g g, & \delta_0 &= \mu^{4-d} Z_\delta \delta, \\ r_0 &= \mu^2 Z_r, & \lambda_0^{-1} &= \mu^2 Z_\lambda \lambda^{-1}, \end{aligned} \quad (32)$$

где масштабный параметр μ вводится для обезразмеривания величин. В (31) $\Gamma^{(2)}$ 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 на каждом 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. Следующим 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:

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

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 β_1 , β_2 , γ_λ при $d = 3$ являются асимптотически сходящимися. Для их суммирования используется метод Паде-Бореля, который и был применен нами к функциям β_1 , β_2 , γ_λ . Примесная фиксированная точка для трехмерной модели Изинга задается значениями $v_1^* = 2.39631$, $v_2^* = 0.60509$, а однородная $v_1^* = 1.59661$, $v_2^* = 0$.

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

суммирования Паде-Бореля к асимптотическому ряду разложения γ_λ по степеням v_1 и v_2 и использование значения констант связи в примесной фиксированной точке для трехмерной модели Изинга дает следующие значения индекса $z_{\text{imp}}^{(2)}(d=3) = 2.237$, 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. В результате для модели Изинга $z_{\text{pure}}^{(3)} = 2.014$, в то время как вычисленное в трехпетлевом приближении ε -разложения $z_{\text{pure}}^{(3)} = 2.025$.

Критическая динамика разбавленных двумерных изинговски подобных магнетиков в релаксационном режиме не отличается от динамики однородной модели. Расчет динамического критического индекса z для двумерной модели Изинга в трехпетлевом приближении без использования метода ε -разложения дал следующее значение: $z_{\text{pure}}^{(3)}(d=2) = 2.277$.

Анализ результатов показывает, 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 **шестой 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. В работе [27] 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:

$$m^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/v} m^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/v}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (33)$$

где t — время, $\tau = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура, b — произвольный масштабный фактор, L — линейный размер решетки, β , v , 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 достаточно мала и конечность размера моделируемой системы оказывается не существенной. Полагая в (33) $b = t^{1/z}$, для первого момента намагниченности ($k = 1$) и малой величины $m_0 t^{1/z}$ получаем следующее выражение:

$$m(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^{\theta'} F(t^{1/\nu z} \tau, t^{x_0/z} m_0) = m_0 t^{\theta'} (1 + at^{1/\nu z} \tau) + O(\tau^2, m_0^2), \quad (34)$$

где $\theta' = (x_0 - \beta/v)/z$. Для $\tau \rightarrow 0$ и достаточно малых t получаем асимптотическое поведение $m(t) \sim t^{\theta'}$. Временной интервал увеличения намагниченности $t_{\text{cr}} \sim m_0^{-z/x_0}$ заметно растет с уменьшением m_0 . С течением времени коротко-временная 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 . Для численного определения показателя θ' рассматривается неупорядоченная трехмерная модель Изинга с линейным размером $L = 128$ и наложенными граничными условиями.

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 [28] и позволяет провести сравнение получаемого в результате моделирования неравновесного критического поведения системы динамических критических индексов z и θ' с результатами ренормгруппового описания.

При исследовании влияния начального неравновесного состояния с $m_0 \ll 1$ для неупорядоченной модели Изинга осуществляется численное определение временной зависимости k -го момента намагниченности $m^{(k)}(t)$ в виде

$$m^{(k)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i S_i(t) \right)^k \right\rangle \right], \quad (35)$$

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

$$A(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} p_i S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right], \quad (36)$$

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

$$A(t) \sim t^{-c_a}, \quad m^{(2)}(t) \sim t^{c_2}, \quad (37)$$

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

Моделирование осуществлялось при критической температуре $T_c = 3.49948(18)$, определенной нами при численных Монте-Карло исследованиях неупорядоченной трехмерной модели Изинга в равновесном 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.

Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей c_a и c_2 в соответствии с (37) и выделить два временных интервала: 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 явлением кроссовера, т.е. перехода от критического поведения, характерного для однородных систем, к поведению, характеризуемого влиянием дефектов. Были определены показатели для каждого линейного участка исследуемых величин. Полученные значения показателей приведены в табл. 1.

Таблица 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)

Нами был осуществлен учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем и неточности в определении их критической температуры. Для этого были применены следующие выражения для временной зависимости наблюдаемых величин $X(t)$:

$$X(t) \sim t^\delta (1 + A_x t^{-\omega/z}), \quad (38)$$

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 $\omega \simeq 0.25(10)$ [29]. 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 $m(t)$, $A(t)$ и $m^{(2)}(t)$ выражением (38). Наряду с аппроксимационной погрешностью $\Delta\delta$ для показателей δ определялась 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 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 $\omega = 0.256(56)$.

Таблица 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), $\omega/z = 0.160$

Также, нами проведено 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.

При анализе временных зависимостей оказалось, что для сильно неупорядоченных 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 . 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.

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 справедливо следующее выражение

$$m(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} m(1, t^{1/\nu z} \tau) = t^{-\beta/\nu z} (1 + at^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2)), \quad (39)$$

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

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (40)$$

Представляя (39) в виде $\ln m(t, \tau) = (-\beta/\nu z) \ln t + \ln m(1, t^{1/\nu z} \tau)$ и дифференцируя по τ можно получить соотношение для логарифмической производной намагниченности

$$\partial_\tau \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}. \quad (41)$$

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

$$U_2(t) = m^{(2)}/(m)^2 - 1. \quad (42)$$

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 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 $\Delta T = \pm 0.005$. 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 режим 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 (38). 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 $m_0 \ll 1$. Так же 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 [30].

В рамках данного метода исследуется развитие двух конфигураций спинов (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:

$$D(L, T, t) = \frac{1}{2N_s} \sum_{i=1}^{N_s} |S_i^A(t) - S_i^B(t)|, \quad (43)$$

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

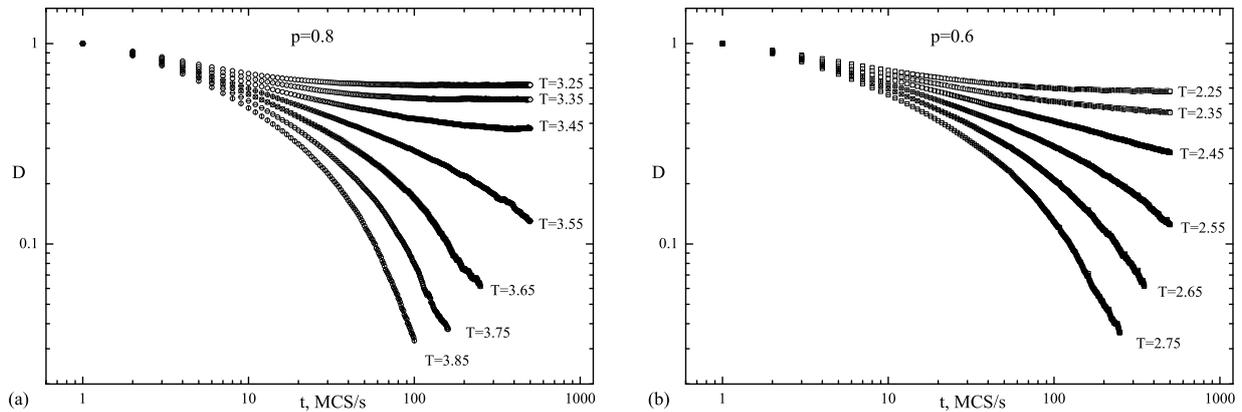


Рисунок 9 Поведение $D(t)$ для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$, при различных температурах

необходимо осуществлять неоднократное повторение эксперимента с использованием различных примесных конфигураций, поэтому при расчете результатов целесообразно использовать среднее значение величины $D(L, T, t)$:

$$\langle D(L, T, t) \rangle = \frac{1}{N_I} \sum_{j=1}^{N_I} D_j(L, T, t), \quad (44)$$

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:

$$\{S_i^A(0)\} = -\{S_i^B(0)\} = 1. \quad (45)$$

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 (рис. 11), 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 рис. 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 [30]:

$$\tau_1(L, T) = \frac{\sum_t \langle t D(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (46)$$

$$\tau_2(L, T) = \frac{\sum_t \langle t^2 D(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (47)$$

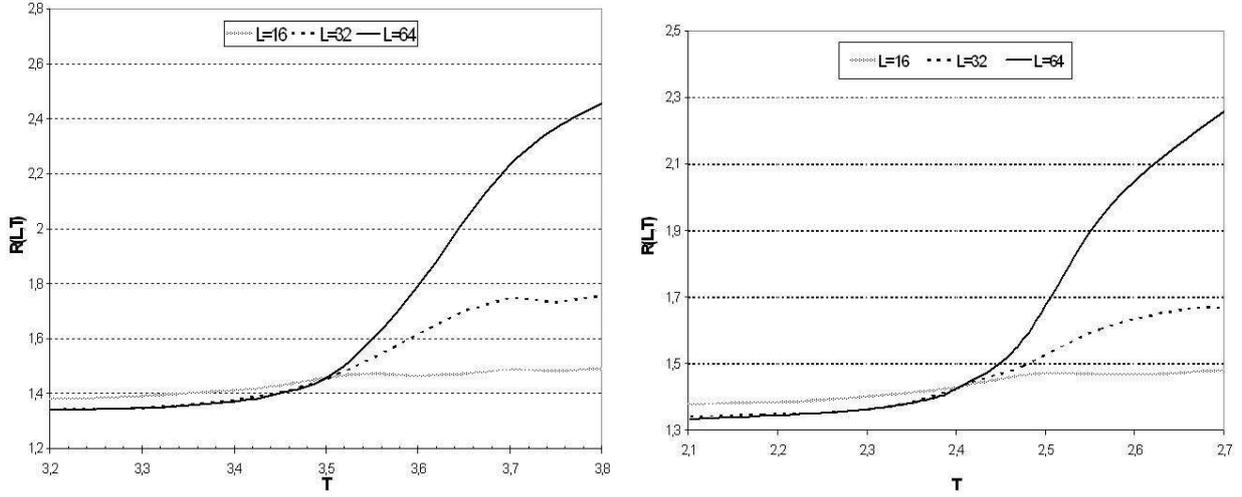


Рисунок 10 Зависимость функции $R(L, T)$ от температуры для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$

Таблица 3 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	3.49942(1)	2.42418(5)
H.O. Heuer, 1993	3.4992(5)	2.4220(6)
A.K. Мургазаев, 2004	3.4956(6)	2.4178(6)
P. Calabrese, 2003		3.49962(24)
H.G. Ballesteros, 1998		3.49972(47)
J.S. Wang, 1989	3.4959(2)	2.4178(2)
В.В. Прудников, 2007	3.49948(18)	2.42413(9)

$$\tau_1(L, T) = u(L)f_1(v(L)(T - T_c)), \quad (48)$$

$$\tau_2(L, T) = u^2(L)f_2(v(L)(T - T_c)). \quad (49)$$

Из выражений (6) - (7) следует, что отношение данных времен

$$R(L, T) = \frac{\tau_2(L, T)}{\tau_1^2(L, T)} \quad (50)$$

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 рис. 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 (Табл.3). 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

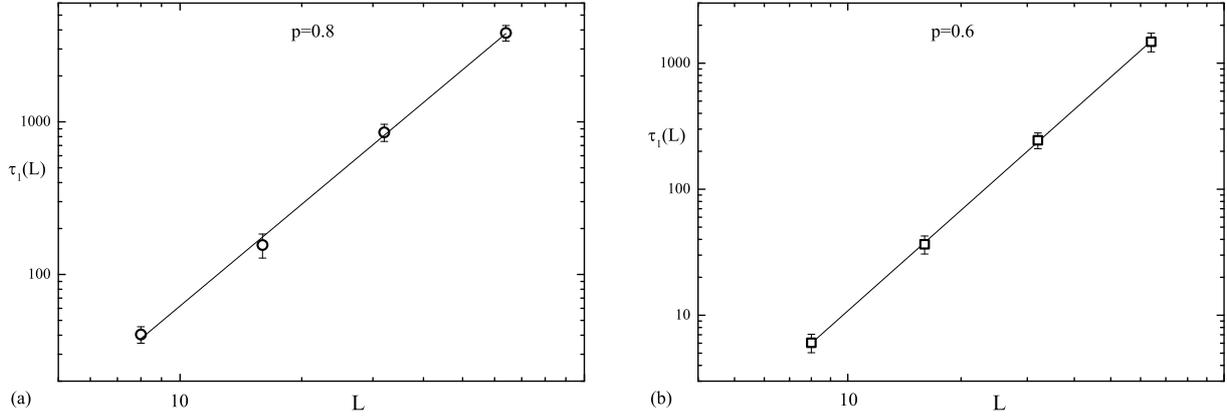


Рисунок 11 Зависимость времени релаксации от линейного размера решетки L ($L = 8, 16, 32, 64$) для трехмерной модели Изинга в случае (а) $p = 0.8$; (б) $p = 0.6$

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 :

$$\tau_r \sim \xi(T)^z. \quad (51)$$

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 критической температуры будет справедливым соотношение:

$$\tau_r \sim L^z. \quad (52)$$

В рамках метода динамики возмущения начального состояния в качестве времени релаксации системы выступает введенное в (4) 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 $L = 8, 16, 32, 64$. 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:

$$\tau_r = AL^z(1 + BL^{-\omega}), \quad (53)$$

где ω - критический индекс поправки к скейлингу. С учетом поправки к скейлингу были получены следующие значения: $z(0.8) = 2.28(7)$, и $z(0.6) = 2.67(8)$.

В седьмой главе представлены результаты численного исследования методами Монте-Карло особенностей влияния дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения трехмерных магнетиков. 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 показателя неравновесности системы. Одной из простых, но нетривиальных статистических моделей, в которой наблюдаются эффекты старения, является d -мерная модель Изинга. Ее динамика является чисто диссипативной и соответствует модели А.

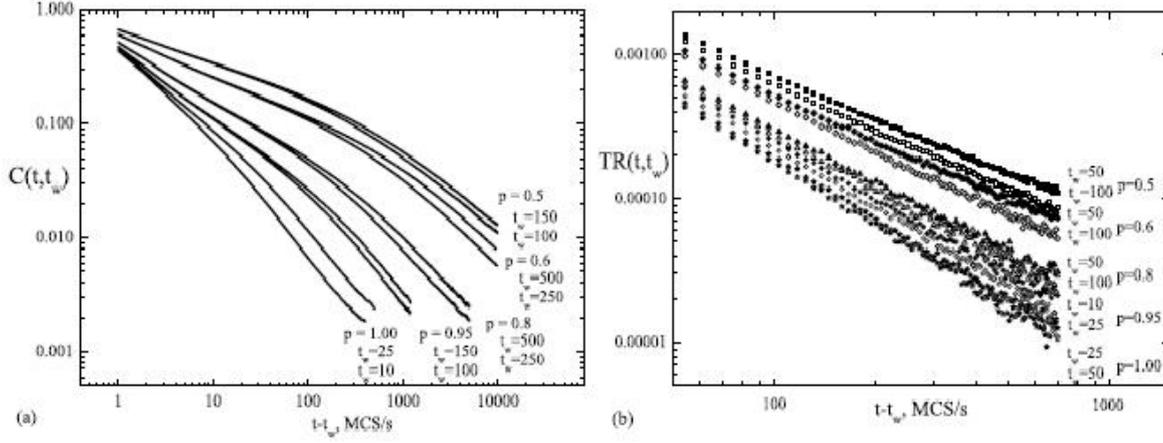


Рисунок 12 Временные зависимости корреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика $TR(t, t_w)$ для различных спиновых концентраций и времен ожидания t_w

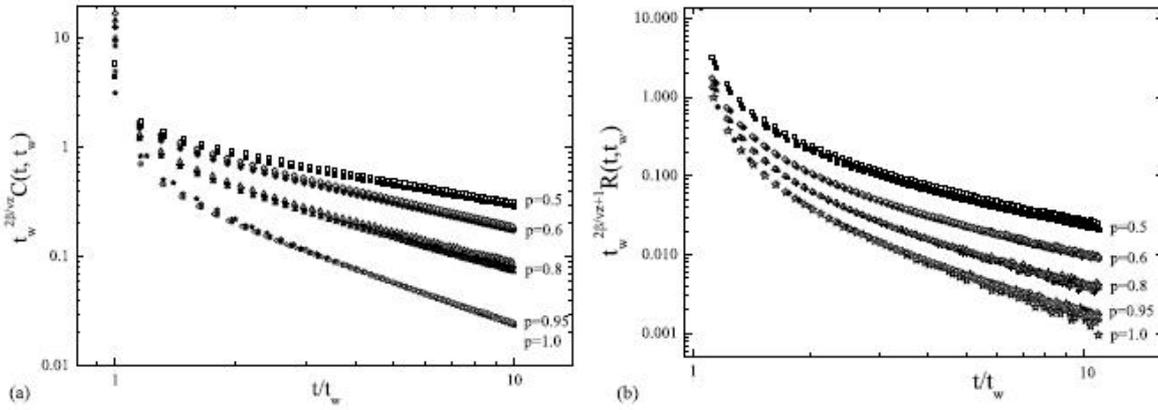


Рисунок 13 Скейлинговый коллапс корреляционной функции $C(t, t_w)$ (а) и функции отклика $R(t, t_w)$ (б) для различных спиновых концентраций и времен ожидания t_w

Моделирование эволюции макроскопической решеточной системы из N спинов осуществлялось в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс одно-спиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани, задающим вероятность перехода спина системы в новое состояние $S_i \rightarrow S'_i$ посредством формулы:

$$W_{\text{sp}}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp[-\beta H(S'_i)]}{\sum_{S_j} \exp[-\beta H(S_j)]}, \quad (54)$$

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

$$W_{\text{sp}}(S_i \rightarrow S'_i) = \frac{\exp[-\beta H(S'_i)]}{\exp[\beta H(S_i)] + \exp[-\beta H(S_i)]} \quad (55)$$

с реализацией так называемой глауберовской динамики.

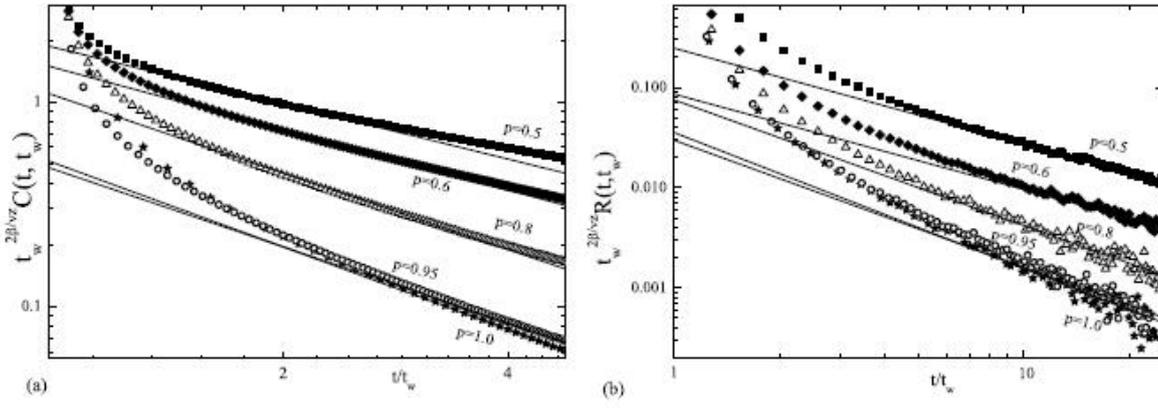


Рисунок 14 Скейлинговые функции для оценки показателей c_a и c_r

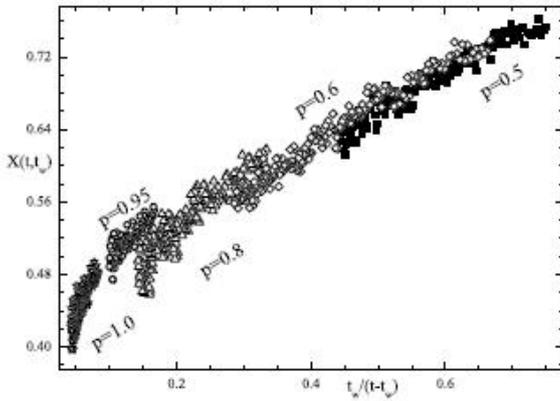


Рисунок 15 Функциональная зависимость флуктуационно-диссипативного отношения $X(t, t_w)$ от $t_w/(t - t_w)$ при $t - t_w \gg t_w$ для различных спиновых концентраций

Осуществлялся расчет намагниченности

$$M(t) = \left\langle \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i(t) \right\rangle \quad (56)$$

и двухвременной автокорреляционной функции

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle - M(t) M(t_w), \quad (57)$$

где угловые скобки характеризуют проводимое статистическое усреднение по различным реализациям начальных конфигураций спинов и Монте-Карло прогонам.

Для случая, когда исследуется критическая релаксация систем из начального высокотемпературного состояния со значением намагниченности расчет функции отклика и флуктуационно-диссипативного отношения проводился с применением соотношений

$$R(t, t_w) = \frac{1}{TL^3} \sum_{i=1}^{L^3} \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle, \quad (58)$$

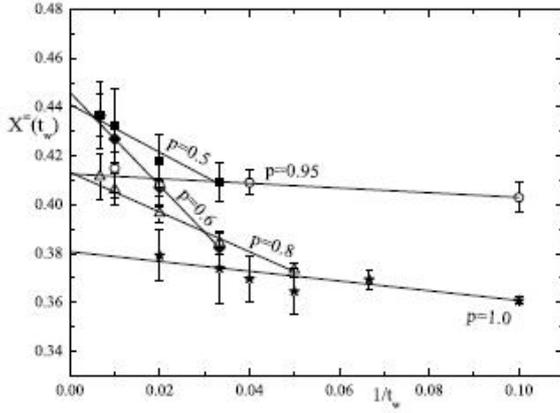


Рисунок 16 Функциональные зависимости ФДО $X(t_w, p)$ от $1/t_w$ для различных спиновых концентраций. Значения $X^\infty(p)$ получаются в пределе $1/t_w \rightarrow 0$ путем линейной аппроксимации

Таблица 4 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)

где $S_i^W = \tanh\left(J \sum_{m \neq i} S_m / T\right)$, и

$$X(t, t_w) = \frac{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t) [S_i(t_w + 1) - S_i^W(t_w + 1)] \rangle}{\sum_{i=1}^N \langle S_i(t_w + 1) - S_i(t_w) \rangle} \quad (59)$$

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.

Было проведено моделирование неравновесного поведения как «чистой», так и структурно неупорядоченной модели Изинга при спиновых концентрациях $p = 1, 0, 0,95, 0,8, 0,6$ и $0,5$ на трехмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ (количество спинов в решетке $NN = pL^3$). Рассматривалась эволюция системы из специально сформированного при $T \gg T_c$ высокотемпературного начального состояния с малым значением намагниченности $m_0 \ll 1$. 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 моделировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 6200 примесным конфигурациям и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации.

На рис. 12 представлены в двойном логарифмическом масштабе полученные зависимости функции отклика $R(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ для набора различных времен ожидания t_w . Наглядно видно проявление эффектов старения через зависимость $R(t, t_w)$ 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.

Для функции отклика ренормгрупповое описание предсказывает следующую скейлинговую

$$R(t, t_w) \sim t_w^{-1-(d-2+\eta)/z} F_R(t/t_w), \quad (60)$$

где d — размерность системы, η, z — критические индексы. Для подтверждения скейлинговой зависимости функции отклика (60) было осуществлено построение зависимости $t_w^{1+(1-\eta)/z} R(t, t_w)$ от $t - t_w/t_w$.

Результат приведен на рис. 13,14 который демонстрирует 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 скейлинговой функцией $F_R(t/t_w)$ в (60).

На временах $t \gg t_w$ скейлинговая функция имеет зависимость $F_R(t/t_w)^{-c_r}$. На этом участке эволюции системы отсутствует влияние эффектов старения и показатель c_r связан с известными динамическими критическими индексами z и θ'

$$c_r = \frac{d}{z} - \theta'. \quad (61)$$

В таблице 4 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 рис. 15 представлено вычисленное на основе формулы (59) 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 ФДО X^∞ (см. таблицу 4). Наглядное представление для осуществленной процедуры аппроксимации дано на рис. 16. В результате были получены следующие значения предельного ФДО: $X^\infty = 0, 381(16)$ для $p = 1, 0$, $X^\infty = 0, 413(7)$ для $p = 0, 95$, $X^\infty = 0, 413(10)$ для $p = 0, 8$, $X^\infty = 0, 446(10)$ для $p = 0, 6$ и $X^\infty = 0, 441(13)$ для $p = 0, 5$. Данные значения 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 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, увеличение их концентрации приводит к существенному усилению эффектов старения.

Заключение содержит список основных результатов, полученных в работе.

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 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.

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 основных публикаций автора 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.- №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.- №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.- № 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.- Т. 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. С. 053A01.
19. Vakilov A.N. Zeros of Partition Function and Critical Exponents of 3D Diluted Ising Model/ **A.N.Vakilov** //Materials Science Forum. -2016.- V. 845.- P. 150-153. (doi:10.4028/www.scientific.net/MSF.845.150)
20. Vakilov A.N. Zeros in parttion funcction 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 моделирования/В.В.Прудников, **А.Н. Вакилов**, П.В.Прудников. –Москва: ФИЗМАТЛИТ -2009, 224 с.(ISBN 978-5-9221-0961-1)
22. 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.(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 критического поведения структурно неупорядоченных систем/ В.В. Прудников, 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 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.

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" вып. 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" вып. 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 systems" Bad 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 XXIX 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 XXIX 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. Криницын, 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 parttion 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 цитируемой 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.// УФН. - 1985. - Т. 146. -№ 3.- С. 459–491.
- [3] 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.
- [4] Хмельницкий Д.Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах/Д.Е.Хмельницкий // ЖЭТФ. - 1975.- Т. 68.- № 5.- С. 1960–1968.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] Фольк Р. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга / Р.Фольк , Ю.Головач, Т. Яворский// УФН. 2003.- Т. 173- № 2.- С. 175–200.
- [8] Afzal N. Aging processes in systems with anomalous slow dynamics/N.Afzal, M. Pleiming // Phys. Rev. E -2013.- V.57 - P.012114.
- [9] Berthier L.Non-equilibrium glass transitions in driven and activematter/L.Berthier,J.Kurchan//Nature Phys. - 2013-V.9. - P.310-324.
- [10] Calabrese P. Aging properties of critical systems/P.Calabrese,A.Cambassi // J. Phys. A. -2005. -V. 38.- P. R133.
- [11] 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.
- [12] Hennecke M. Critical Dynamics of Cluster Algorithms in the Dilute Ising Model/M. Hennecke, U.Heyken // J. Stat. Phys.- 1993.- V. 72. -P. 829.
- [13] 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.
- [14] Fisher M.E. The theory of equilibrium critical phenomena./M.E.Fisher //Rep. Progr. Phys. - 1967.- V. 30.- P. 615–730.

- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] Прудников В.В. Особенности фазовых превращений в неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга /В.В.Прудников,О.Н.Марков,Е.В.Осинцев // ЖЭТФ.- 1999.- Т. 116.- № 3. - С. 953–961.
- [19] Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния / В.С. Доценко // УФН. -1993. - Т. 163. - № 6 - С. 1-37.
- [20] Jan N. Dynamic Monte Carlo renormalization group /N.Jan,L.L.Moseley,D.Stauffer // J. Stat. Phys. - 1983.- V. 33.- № 1 - P. 1-11.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Дороговцев С.Н.Критические свойства магнетиков с дислокациями и точечными примесями /С.Н.Дороговцев // ЖЭТФ.- 1981.- Т. 80.- № 5- С. 2053 - 2067.
- [24] 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.
- [25] De Dominicis C. Field-theoretic techniques and critical. I. Ginzburg-Landau stochastic models without energy conservation / C. De Dominicis, E.Brezin, J.Zinn-Justin J// Phys. Rev. B. - 1975. - V. 12.- № 11 - P. 4945–4952.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] Hohenberg P.C.Theory of dynamic critical phenomena/P.C.Hohenberg,B.I.Halperin B.I. // Rev. Mod. Phys. - 1977.- V. 49.- P. 435–479.
- [29] Pelissetto A. Randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study /A. Pelissetto,E.Vicari// Phys. Rev. B.- 2000.- V. 62.- P. 6393.
- [30] 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.