Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 10, с. 693 – 699

Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для неравновесного критического поведения неупорядоченных систем

П. В. Прудников[1], В. В. Прудников, Е. А. Поспелов

Омский государственный университет им. Достоевского, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 26 июля 2013 г.

После переработки 14 октября 2013 г.

Для неупорядоченной трехмерной модели Изинга проведен расчет значений новой универсальной характеристики неравновесного критического поведения – флуктуационно-диссипативного отношения, задающего фундаментальную связь между динамической функцией отклика и корреляционной функцией. На основе анализа двухвременной зависимости автокорреляционных функций и динамической восприимчивости для систем со спиновыми концентрациями $p = 1.0$, 0.8 и 0.6 выявлены эффекты старения, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации системы с ростом времени ожидания, и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы. С целью повышения точности для расчета динамической восприимчивости применена методика "тепловой бани" без введения в моделирование внешнего магнитного поля. Показано, что присутствие дефектов структуры приводит к существенному усилению эффектов старения.

DOI: 10.7868/S0370274X13220086

В настоящее время большой интерес исследователей вызывает поведение систем, характеризующихся аномально медленной динамикой [1, 2]. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризуемыми нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Хорошо известными примерами подобных систем с аномально медленной динамикой и эффектами старения являются такие комплексные неупорядоченные системы, как спиновые стекла [3]. Однако указанные особенности неравновесного поведения, как показали различные исследования [4, 5], могут наблюдаться и в системах, испытывающих фазовые переходы второго рода. Это обусловлено тем, что их поведение вблизи критических температур характеризуется аномально большими временами релаксации.

В окрестности температуры T_c фазового перехода второго рода время релаксации системы является расходящейся величиной: $t_{\rm rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$. Таким образом, системы в критической точке не достигают равновесия в течение всего релаксационного процесса. Именно на этапе $t \ll t_{\rm rel}$ проявляются эффекты старения. Они выражаются в существовании двухвременных зависимостей для корреляционной функции и функции отклика от времени ожидания t_w и времени наблюдения $t - t_w$. Время ожидания есть время, прошедшее с момента приготовления образца до начала измерения его характеристик. В интервале $t - t_w \ll t_{\rm rel}$ во временном поведении системы проявляется влияние начальных состояний системы.

В качестве характеристик неравновесного поведения макроскопических систем и их перехода в состояние равновесия могут выступать флуктуационно-диссипативные соотношения (теоремы) [6]. Принципиально важным проявлением медленной динамики является нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) [5, 7], которая связывает функцию отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{T}\frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \qquad (1)$$

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

$$X^\infty = \lim_{t_w\to\infty}\lim_{t\to\infty} X(t, t_w) \qquad (2)$$

может быть использовано в качестве новой универсальной характеристики неравновесного критического поведения различных систем.

В данной работе решается задача численного Монте-Карло исследования с применением алгоритма тепловой бани особенностей влияния дефектов

[1]e-mail: prudnikp@univer.omsk.su

структуры на характеристики неравновесного критического поведения анизотропных спиновых систем, описываемых трехмерной моделью Изинга. Проводить изучение релаксационной динамики подобных систем значительно легче, чем изучение таких сложных неупорядоченных систем, как спиновые стекла. При этом такие системы на неравновесном этапе критической эволюции демонстрируют аналогичные спиновым стеклам эффекты старения и отклонение от единицы предельной величины ФДО как показателя неравновесности системы.

Как показано в работе [8], обобщенные флуктуационно-диссипативные соотношения [9–11] справедливы для применяемых односпиновых алгоритмов моделирования неравновесных процессов. Природа нарушения ФДТ определяется объектом исследования, характеризующимся аномально медленной динамикой вблизи критической точки.

К настоящему времени ренормгрупповые [12–14], численные [15–17] и экспериментальные [18] методы исследования критической динамики структурно неупорядоченных систем позволили однозначно установить следующее. Присутствие в системах как некоррелированных дефектов структуры, так и дефектов с эффектами дальнодействующей корреляции приводит к новым типам критического поведения и заметному усилению эффектов критического замедления по сравнению с "чистыми" системами. В связи с этим такие особенности неравновесного поведения, как эффекты старения, несомненно, должны найти более яркое проявление в структурно неупорядоченных системах с новыми универсальными значениями флуктуационно-диссипативного отношения.

Ренормгрупповые расчеты ФДО, проведенные в работах [19, 7] в рамках метода ε-разложения для диссипативной модели с несохраняющимся параметром порядка в низших порядках теории, показали следующее. Сложности выделения флуктуационных поправок в двухвременных зависимостях для корреляционной функции и функции отклика не позволяют пока с достаточной убедительностью выявить характер влияния дефектов на относительное соответствие значений предельного ФДО для структурно неупорядоченной и «чистой» модели Изинга.

Проведенные нами в данной работе численные Монте-Карло исследования, непертурбативные по своей основе, позволяют более однозначно ответить на этот вопрос. Они дают возможность выделить влияние дефектов структуры на эффекты старения и значения ФДО в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Изинга.

Функция отклика $R(t,t_w)$ спиновой системы на внешнее магнитное поле, приложенное к системе в момент времени t_w, определяется соотношением ($t > t_w$)

$$R\,(t,t_w) = \frac{1}{V}\int d^d x\; \frac{\delta\,\langle\sigma(x,t)\rangle}{\delta h(x,t_w)}\bigg|_{h=0}. \qquad (3)$$

Однако линейная функция отклика, соответствующая данному определению, не может быть непосредственно измерена экспериментально или получена методами компьютерного моделирования. В данной работе для исследования нарушения ФДТ мы применили методику [20, 21]. Эта методика позволяет при моделировании динамики системы с помощью алгоритма тепловой бани получить функцию отклика без введения магнитного поля, выразив ее через специальную двухвременную корреляционную функцию:

$$R(t,t_w) = \frac{1}{N}\,\beta\sum_{i=1}^{N}\left\langle \sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1) - \sigma_i^W(t_w+1)\Big]\ \right\rangle, \qquad (4)$$

где N – число спинов на решетке, $\beta = 1/T$ – обратная температура, $\sigma_i^W = \mathrm{th}(\beta J\sum_{j\neq i}\sigma_j)$ с суммированием по j ближайшим соседям спина в i-м узле, $J>0$ – интеграл обменного взаимодействия для ближайших спинов.

Исследование особенностей неравновесного критического поведения было проведено на примере популярной статистической модели для описания ферромагнитного фазового перехода в анизотропных спиновых системах – трехмерной модели Изинга. Ее гамильтониан с учетом влияния локального магнитного поля h_i задается выражением

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i, \qquad (5)$$

где $\sigma_i = \pm 1$ - изинговские спиновые переменные, характеризующие значения локального параметра порядка (приведенной намагниченности). Сумма в (5) пробегает по спинам в ближайших узлах кубической решетки.

С целью выявления влияния дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения нами рассматривалась также трехмерная разбавленная немагнитными атомами примеси модель Изинга, характеризуемая гамильтонианом

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}p_i p_j\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i p_i\sigma_i, \qquad (6)$$

где p_i – случайное число, равное 1, если в узле находится спин, и 0 в случае его отсутствия (магнитный атом замещен немагнитным атомом примеси).

Дефекты структуры равномерно распределяются по всей системе. При моделировании их положение фиксируется для отдельной примесной конфигурации (случай замороженных дефектов структуры).

Моделирование эволюции макроскопической решеточной системы из N спинов осуществлялось в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс односпиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани [22]. Он задает вероятность перехода спина системы в новое состояние, $\sigma_i \to \sigma_i'$, посредством формулы

$$W_{\mathrm{sp}}\left(\sigma_i \to \sigma_i'\right) = \frac{\exp\left[-\beta H(\sigma_i')\right]}{\sum_{\sigma_j} \exp\left[-\beta H(\sigma_j)\right]}, \qquad (7)$$

где суммирование по σ_j в знаменателе проводится по всем возможным состояниям спина σ_i до переворота. В качестве единицы времени динамического процесса был выбран шаг Монте-Карло на спин (МК/спин), который обозначает N последовательных переворотов спинов в узлах решетки. Для модели Изинга с двумя возможными состояниями, $\sigma_j = \pm 1$, указанную вероятность переворота можно записать в виде

$$W_{\mathrm{sp}}\left(\sigma_i \to \sigma_i'\right) = \frac{\exp\left[-\beta H(\sigma_i')\right]}{\exp\left[\beta H(\sigma_i)\right] + \exp\left[-\beta H(\sigma_i)\right]} \qquad (8)$$

с реализацией так называемой глауберовской динамики.

Опишем методику определения двухвременной зависимости функции отклика для модели Изинга в рамках применения алгоритма тепловой бани. Как известно, динамическая эволюция модели в критической точке является марковским процессом. Обозначим через $\varphi(\{\sigma\}, t)$ вероятность нахождения системы в состоянии с конфигурацией спинов $\{\sigma\}$ в момент времени t. Основное кинетическое уравнение для случая дискретного времени может быть представлено в виде

$$\begin{aligned}\varphi\left(\{\sigma\}, t + \Delta t\right) = (1 - \Delta t)\, \varphi\left(\{\sigma\}, t\right) + \\ + \Delta t \sum_{\{\sigma'\}} W\left(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}, t\right) \varphi\left(\{\sigma'\}, t\right),\end{aligned} \qquad (9)$$

где $W\left(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}, t\right)$ – вероятность перехода из состояния $\{\sigma'\}$ в состояние $\{\sigma\}$ в момент времени t, удовлетворяющая условию нормировки $\sum_{\{\sigma'\}} W\left(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}, t\right) = 1$. Можно показать, что аналогичному кинетическому уравнению удовлетворяет и условная вероятность перехода $\varphi\left(\{\sigma\}, t | \{\sigma'\}, t_w\right)$, т.е. вероятность обнаружения системы в момент времени t в состоянии $\{\sigma\}$ при условии, что в момент времени $t > t_w$ система находилась в состоянии $\{\sigma'\}$:

$$\begin{aligned}&\varphi(\{\sigma\}, t + \Delta t | \{\sigma'\}, t_w) = \\ &= (1 - \Delta t) \varphi(\{\sigma\}, t | \{\sigma'\}, t_w) + \\ &+ \Delta t \sum_{\{\sigma''\}} W\left(\{\sigma''\} \to \{\sigma\}, t\right) \varphi\left(\{\sigma''\}, t | \{\sigma'\}, t_w\right).\end{aligned} \qquad (10)$$

Данная условная вероятность вводится с помощью формулы Байеса:

$$\varphi(\{\sigma\}, t) = \sum_{\{\sigma'\}} \varphi(\{\sigma\}, t | \{\sigma'\}, t_w)\ \varphi(\{\sigma'\}, t_w). \qquad (11)$$

В динамике тепловой бани вероятность изменения состояния системы из N спинов выражается через вероятность односпиновых переворотов (8) за один шаг Монте-Карло на спин следующим образом:

$$\begin{aligned}W(\{\sigma\} \to \{\sigma'\}, t) &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} W_k(\{\sigma\} \to \{\sigma'\}) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \Big[\prod_{l \neq k} \delta_{\sigma_l \sigma_l'}\Big] W_{\mathrm{sp}}(\sigma_k \to \sigma_k'),\end{aligned} \qquad (12)$$

где произведение дельта-функций задает требование, чтобы все остальные спины системы, за исключением σ_k, не модифицировались в процессе изменения состояния системы.

Временная зависимость вероятности изменения состояния системы $W(\{\sigma\} \to \{\sigma'\}, t)$ могла бы вызвать нарушение временной трансляционной инвариантности условных вероятностей перехода в уравнении (10). Однако фактически реализуемая вероятность изменения состояния в (12) не зависит от времени, т.к. в течение шага Монте-Карло за промежуток времени $N\Delta t$ происходит циклический процесс переворотов N спинов системы.

Используя кинетическое уравнение (9) и формулу Байеса, среднее значение спина $\langle \sigma_j \rangle$ в момент времени $t > t_w$ можно записать в виде

$$\begin{aligned}\langle \sigma_j \rangle &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j \varphi(\{\sigma\}, t) = \\ &= \sum_{\{\sigma\}, \{\sigma'\}} \sigma_j \varphi(\{\sigma\}, t | \{\sigma'\}, t_w + \Delta t) \times \\ &\times \Bigg[(1 - \Delta t) \varphi(\{\sigma'\}, t_w) + \\ &+ \Delta t \frac{1}{N} \sum_{\{\sigma''\}} \sum_{k=1}^{N} W_k\left(\{\sigma''\} \to \{\sigma'\}\right)\ \varphi(\{\sigma''\}, t_w) \Bigg].\end{aligned} \qquad (13)$$

При нахождении функции отклика в соответствии с (3) нас будет интересовать производная $\partial \left\langle \sigma_j(t) \right\rangle / \partial h_i$ в пределе $h_i \to 0$. Поскольку в (13) только W_k зависят от поля h_i через выражение (8) и гамильтониан

(5) (или в общем случае через гамильтониан (6)), после дифференцирования получим выражение

$$\left.\frac{\partial\langle\sigma_j(t)\rangle}{\partial h_i}\right|_{h_i\to 0} = \\ = \Delta t \sum_{\{\sigma\},\{\sigma'\},\{\sigma''\}} \sigma_j \varphi(\{\sigma\},t|\{\sigma'\},t_w+\Delta t) \times \\ \times \frac{1}{N}\left[\frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{\sigma''\}\to\{\sigma'\})\right]_{h_i\to 0} \varphi(\{\sigma''\},t_w). \quad (14)$$

Данная производная определяет обобщенную восприимчивость системы для случая инфинитезимального магнитного поля, приложенного к спину в узле i и действующего во временном интервале $[t_w, t_w+\Delta t]$:

$$\chi_{ji}\big(t,[t_w,t_w+\Delta t]\big) = \frac{\partial\langle\sigma_j(t)\rangle}{\partial h_i}. \quad (15)$$

Дифференцирование вероятности перехода в (14) с учетом (8) дает выражение

$$\left.\frac{\partial W_i}{\partial h_i}(\{\sigma''\}\to\{\sigma'\})\right|_{h_i\to 0} = \\ = \beta W_i(\{\sigma''\}\to\{\sigma'\})|_{h_i=0}\left[\sigma'_i - \sigma_i^W\right], \quad (16)$$

где $\sigma_i^W = \operatorname{th}\left(\beta J\sum_{k\neq i}\sigma'_k\right)$. В правую часть уравнения (16) входит вероятность перехода $W_i(\{\sigma''\}\to \to\{\sigma'\})|_{h_i=0}$, которая задает динамику односпиновых переворотов уже в отсутствие магнитного поля.

Подставляя (16) в (14), а также используя кинетические уравнения (9) и (10), после суммирования по состояниям σ'' получаем обобщенную восприимчивость в виде

$$\chi_{ji}(t,[t_w,t_w+N\Delta t]) = \\ = \beta\sum_{\{\sigma\},\{\sigma'\}}\sigma_j\varphi(\{\sigma\},t|\{\sigma'\},t_w+N\Delta t)\Big[\sigma'_i-\sigma_i^W\Big]\times \\ \times\Big[\varphi(\{\sigma'\},t_w+N\Delta t)-(1-N\Delta t)\varphi(\{\sigma'\},t_w)\Big]. \quad (17)$$

Функция отклика R_{ji} связана с обобщенной восприимчивостью через выражение

$$\chi_{ji}(t,[t_w,t_w+N\Delta t]) = \int_{t_w}^{t_w+N\Delta t} R_{ji}(t,s)ds = \\ = R_{ji}(t,t_w)N\Delta t + O(\Delta t^2). \quad (18)$$

Время в численном моделировании является дискретной величиной. Поэтому полагая в (17) и (18) $N\Delta t = 1$ МК/спин, получаем

$$R_{ji}(t,t_w) = \chi_{ji}(t,[t_w,t_w+1]) = \\ = \beta\left\langle\sigma_j(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i^W(t_w+1)\Big]\right\rangle. \quad (19)$$

В результате выражение для функции отклика для численного Монте-Карло исследования представляется в виде

$$R(t,t_w) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N R_{ii} = \frac{1}{N}\beta\times \\ \times\sum_{i=1}^N\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i^W(t_w+1)\Big]\right\rangle, \quad (20)$$

то есть $R(t,t_w)$ усредняется по переворотам N спинов в течение одного шага Монте-Карло.

Двухвременная автокорреляционная функция задается выражением

$$C(t,t_w) = \left\langle\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\sigma_i(t)\sigma_i(t_w)\right\rangle. \quad (21)$$

Поэтому ее производная по времени ожидания принимает следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t_w}C(t,t_w) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i(t_w)\Big]\right\rangle. \quad (22)$$

В соответствии с определением (1) при использовании полученных выражений (20)–(22) флуктуационно-диссипативное отношение может быть вычислено на основе следующей итоговой формулы:

$$X(t,t_w) = \frac{TR(t,t_w)}{\frac{\partial}{\partial t_w}C(t,t_w)} = \\ = \frac{\sum_{i=1}^N\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i^W(t_w+1)\Big]\right\rangle}{\sum_{i=1}^N\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i(t_w)\Big]\right\rangle}. \quad (23)$$

В работе [21] показано, что для времен $t > t_w \gg t_{\rm rel}$ при использовании в изложенной выше процедуре равновесной больцмановской функции распределения для обобщенной восприимчивости получается выражение

$$\chi_{ji}^{\rm eq}\big(t,[t_w,t_w+\Delta t]\big) = \beta\left\langle\sigma_j(t)\Big[\sigma_i(t_w+\Delta t)-\sigma_i(t_w)\Big]\right\rangle_{\rm eq}, \quad (24)$$

а при использовании соотношений (18) и (19) выражение

$$R_{ii}^{\rm eq}(t,t_w) = \beta\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+1)-\sigma_i^W(t_w+1)\Big]\right\rangle_{\rm eq} = \\ = \beta\left\langle\sigma_i(t)\Big[\sigma_i(t_w+\Delta t)-\sigma_i(t_w)\Big]\right\rangle_{\rm eq}. \quad (25)$$

Таким образом, выражение (23) для флуктуационно-диссипативного отношения характеризуется тем, что

$X(t > t_w \gg t_{\rm rel}) = 1$ в соответствии с ФДТ для квазиравновесного и равновесного состояний [9].

В данной работе проведено моделирование неравновесного поведения как "чистой", так и структурно неупорядоченной модели Изинга при спиновых концентрациях $p = 1.0$, 0.8 и 0.6 на трехмерной кубической решетке с линейным размером $L = 128$ (количество спинов в решетке $N = pL^3$). Рассматривалась эволюция системы из специально сформированного высокотемпературного начального состояния с малым значением намагниченности, $m_0 = \langle m(t=0)\rangle_{\rm av} \ll 1$, где $\langle \ldots \rangle_{\rm av}$ обозначает среднее по различным реализациям начального состояния. Для этого с вероятностью $p_+ = (1+m_0)/2$ случайно выбранному спину системы задавалось значение $\sigma_i = +1$ и с вероятностью $p_- = (1-m_0)/2$ – значение $\sigma_i = -1$ с дисперсией намагниченности начального состояния $\Delta_0 = \left\langle [m(t=0) - m_0]^2 \right\rangle_{\rm av} \sim 1/N$. Так как при $m_0 \ll 1$ вероятности $p_\pm \simeq 1/2$, получающейся начальной спиновой конфигурации соответствует эффективная температура $T \gg T_c$. Так, для рассматриваемых систем начальные состояния характеризовались значением намагниченности $m_0 = 0.02$ для $p = 1.0$, $m_0 = 0.01$ для $p = 0.8$ и $m_0 = 0.005$ для $p = 0.6$.

После приготовления начальной конфигурации динамика системы реализовывалась при критических температурах $T_c(p=1) = 4.5114(1)$, $T_c(p = 0.8) = 3.4995(2)$ и $T_c(p = 0.6) = 2.4241(1)$, соответствующих рассматриваемым спиновым концентрациям [15, 16]. Поведение систем исследовалось на временах до 10000 шагов Монте-Карло на спин. При моделировании "чистой" системы проводилось статистическое усреднение по 94000 прогонок. При моделировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 6200 примесным конфигурациям и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации.

Для того чтобы временные интервалы численного исследования соответствовали режиму неравновесной эволюции системы, предварительно определялось временное поведение намагниченности

$$m(t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i^N p_i \sigma_i(t) \right\rangle \qquad (26)$$

при критической температуре. На рис. 1 представлены полученные временные зависимости $m(t)$ для систем с рассматриваемыми спиновыми концентрациями p. На этапе неравновесной эволюции наблюдается характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом $m(t) \sim t^{\theta'}$, где θ' – независимый динамический критический индекс [23, 12, 16].

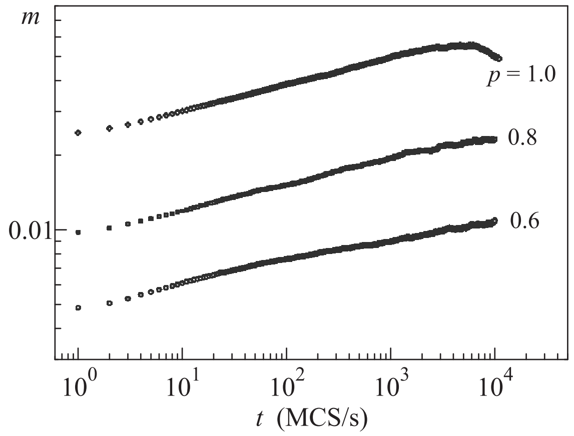

Рис. 1. Временные зависимости намагниченности $m(t)$ для различных спиновых концентраций

При временах $t > t_c \sim m_0^{-1/(\theta' + \beta/z\nu)}$ режим неравновесной эволюции переходит в квазиравновесный режим критической релаксации системы, на котором двухвременные характеристики $C(t, t_w) = C(t - t_w)$, $R(t, t_w) = R(t - t_w)$. Этап критической релаксации характеризуется степенной временной зависимостью намагниченности $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$, где β, ν – известные статические индексы, определяющие равновесное критическое поведение намагниченности и корреляционной длины, а z – динамический критический индекс, характеризующий критическое замедление времени релаксации системы. При эволюции системы из начального упорядоченного состояния с $m_0 = 1$ временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определяется степенной зависимостью $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. С целью получения характеристик, соответствующих неравновесному режиму, рассматривались лишь времена $t < t_c$.

На рис. 2 в двойном логарифмическом масштабе представлены полученные зависимости функции отклика $R(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ для набора различных времен ожидания t_w. Эффекты старения наглядно проявляются через зависимость $R(t, t_w)$ от "возраста" системы t_w (с увеличением возраста системы ее реакция на внешние возмущения уменьшается). Кроме того, с ростом концентрации дефектов (уменьшением спиновой концентрации p) релаксация системы замедляется.

Для функции отклика ренормгрупповое описание предсказывает следующую скейлинговую двухвременную зависимость:

$$R(t, t_w) \sim t_w^{-1-(d-2+\eta)/z} F_R(t/t_w), \qquad (27)$$

где d – размерность системы, η, z – критические индексы. Для подтверждения скейлинговой зависимо-

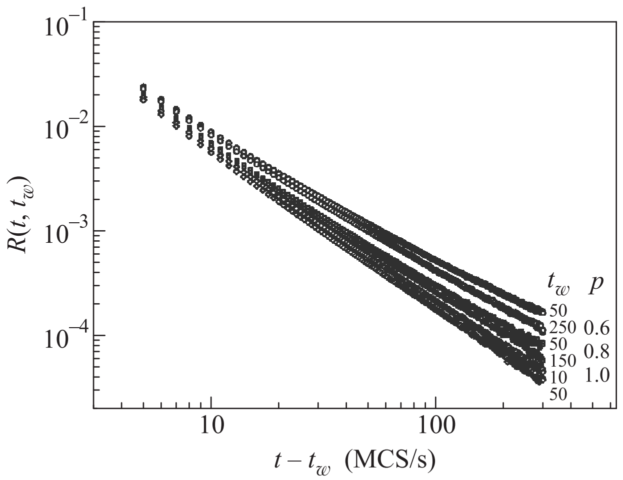

Рис. 2. Зависимости функции отклика $R(t, t_w)$ от времени наблюдения $t - t_w$ для различных спиновых концентраций и времен ожидания t_w

сти функции отклика (27) было осуществлено построение зависимости $t_w^{1+(1+\eta)/z} R(t, t_w)$ от $t - t_w/t_w$ (рис. 3). Наблюдается "коллапс" полученных для раз-

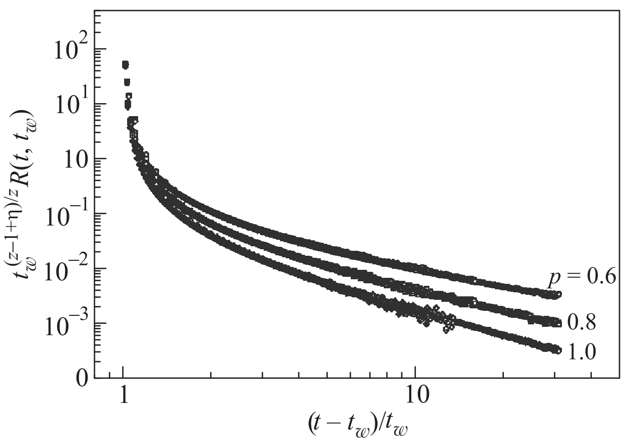

Рис. 3. Скейлинговые зависимости функции отклика для различных спиновых концентраций с характерным "коллапсом" данных для различных t_w на универсальных кривых

личных t_w данных на соответствующих $p = 1.0$, $p = 0.8$ и $p = 0.6$ универсальных кривых, характеризуемых скейлинговой функцией $F_R(t/t_w)$ в (27).

На временах $t \gg t_w$ скейлинговая функция имеет зависимость $F_R(t/t_w) \approx A_R(t/t_w)^{-c_r}$. На этом участке эволюции системы отсутствует влияние эффектов старения и показатель c_r связан с известными динамическими критическими индексами z и θ' [16]:

$$c_r = \frac{d}{z} - \theta'. \tag{28}$$

Таблица 1

Значения показателя скейлинговой функции c_r, полученные в пределе $t \gg t_w$

Источник	$p = 1.0$	$p = 0.8$	$p = 0.6$
Данная работа	1.357(18)	1.251(22)	0.950(8)
[24]	1.362(19)		
[16]		1.242(10)	
[25]			0.993(60)

В табл. 1 представлены значения показателей c_r, рассчитанные нами для различных спиновых концентраций p, а также значения показателей для автокорреляционных функций $c_a = d/z - \theta'$, рассчитанные в работах [16, 24] методом коротковременной динамики. Видно, что для «чистой» системы и системы с $p = 0.8$ значения показателей c_r и c_a хорошо согласуются друг с другом в пределах статистических погрешностей.

Таблица 2

Значения флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для систем со спиновыми концентрациями $p = 1.0$, 0.8 и 0.6

t_w	X^∞		
	$p = 1.0$	$p = 0.8$	$p = 0.6$
10	0.361(2)		
15	0.369(4)		
20	0.365(10)	0.373(3)	
25	0.369(9)		
30	0.374(14)	0.384(5)	0.382(1)
50	0.379(10)	0.397(4)	0.407(3)
100		0.406(6)	0.427(6)
150		0.412(9)	0.437(9)
$\to \infty$	**0.380(13)**	**0.413(11)**	**0.446(8)**

На рис. 4 представлено вычисленное на основе формулы (23) флуктуационно-диссипативное отношение 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 $t_w/(t - t_w) \to 0$ дает возможность определить значения $X(t_w)$ для каждого t_w (см. табл. 2) и соответствующей спиновой концентрации. К полученным значениям $X(t_w)$ для различных времен ожидания была применена аппроксимация $X(t_w \to \infty)$, которая и позволила определить искомое предельное флуктуационно-диссипативное отношение X^∞. Наглядное представление осуществленной процедуры аппроксимации дано на рис. 5. В

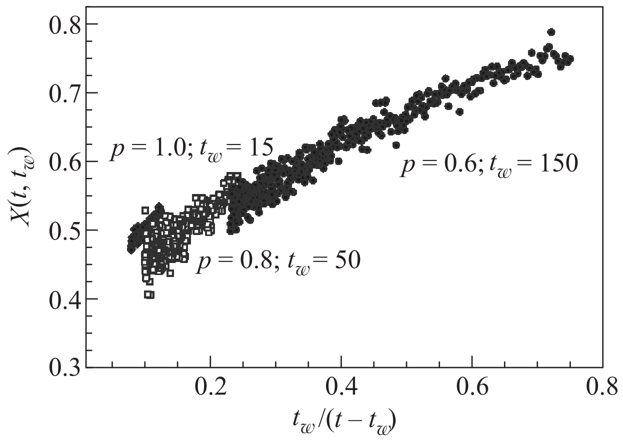

Рис. 4. Функциональная зависимость флуктуационно-диссипативного отношения $X(t, t_w)$ от $t_w/(t-t_w)$ при $t - t_w \gg t_w$ для различных спиновых концентраций

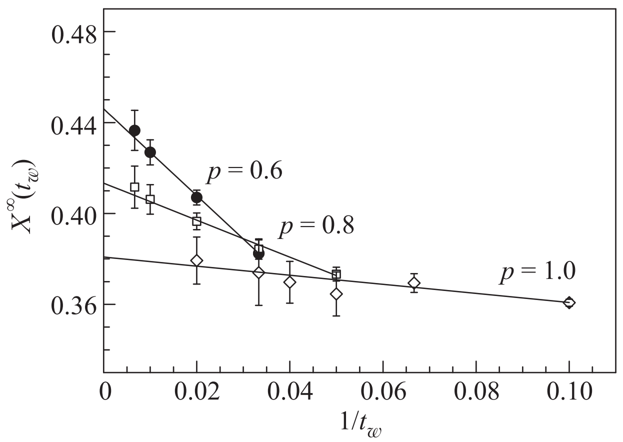

Рис. 5. Функциональные зависимости флуктуационно-диссипативного отношения $X(t_w, p)$ от $1/t_w$ для различных спиновых концентраций. Значения $X^\infty(p)$ получаются в пределе $1/t_w \to 0$ путем линейной аппроксимации

результате были получены следующие значения предельного ФДО: $X^\infty = 0.380(13)$ для $p = 1.0$, $X^\infty = 0.413(11)$ для $p = 0.8$ и $X^\infty = 0.446(8)$ для $p = 0.6$.

Полученные значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ указывают на нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в неравновесном критическом поведении “чистых” и структурно неупорядоченных систем, описываемых трехмерной моделью Изинга, а также на то, что присутствие дефектов структуры приводит к увеличению значений X^∞.

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

1. M. Henkel and M. Pleimling, *Ageing and Dynamical scaling far from equilibrium*, in *Non-equilibrium Phase Transitions*, Heidelberg: Springer (2010), p. 2.
2. N. Afzal and M. Pleimling, Phys. Rev. E **87**, 012114 (2013).
3. L. Berthier and J. Kurchan, Nature Phys. **9**, 310 (2013).
4. P. Calabrese and A. Gambassi, J. Phys. A **38**, R133 (2005).
5. L. Berthier, P. C. W. Holdsworth, and M. Sellitto, J. Phys. A **34**, 1805 (2001).
6. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, УФН **183**, 617 (2013).
7. P. Calabrese and A. Gambassi, Phys. Rev. B **66**, 212407 (2002).
8. J. P. Nilmeier, G. E. Crooks, D. D. L. Minh, and J. D. Chodera, PNAS **108**, E1009 (2011).
9. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, ЖЭТФ **72**, 238 (1977).
10. G. E. Crooks, J. Stat. Phys. **90**, 1481 (1998).
11. C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
12. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. А. Калашников, С. С. Циркин, ЖЭТФ **133**, 1251 (2008).
13. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. А. Калашников, М. В. Рычков, ЖЭТФ **137**, 287 (2010).
14. П. В. Прудников, Д. Н. Куликов, Письма в ЖЭТФ **93**, 103 (2011).
15. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
16. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. S. Krinitsyn, A. N. Vakilov, E. A. Pospelov, and M. V. Rychkov, Phys. Rev. E **81**, 011130 (2010).
17. P. V. Prudnikov and M. A. Medvedeva, Progr. Theor. Phys. **127**, 369 (2012).
18. N. Rosov, C. Hohenemser, and M. Eibschutz, Phys. Rev. B **46**, 3452 (1992).
19. P. Calabrese and A. Gambassi, Phys. Rev. E **66**, 066101 (2002).
20. F. Ricci-Tersenghi, Phys. Rev. E **68**, 065104 (2003).
21. C. Chatelain, J. Stat. Mech. P06006 (2004).
22. W. Janke, *Monte Carlo methods in classical statistical physics*, in *Lecture Notes in Physics*, Berlin: Springer (2008), v. 739, p. 79.
23. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, Z. Phys. B **73**, 539 (1989).
24. A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke, and B. Zheng, J. Phys. A **32**, 1395 (1999).
25. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем*, М.: Физматлит (2013).