Письма в ЖЭТФ, том 102, вып. 3, с. 192 – 201 © 2015 г. 10 августа

Эффекты старения и памяти в неравновесном критическом поведении структурно неупорядоченных магнетиков при эволюции из низкотемпературного начального состояния

В. В. Прудников[1)], *П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, П. Н. Маляренко*

Омский государственный университет им. Достоевского, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 14 мая 2015 г.
После переработки 29 июня 2015 г.

Осуществлено численное исследование методами Монте-Карло неравновесной критической эволюции структурно неупорядоченных анизотропных магнетиков из начального низкотемпературного состояния с приведенной намагниченностью $m_0 = 1$ для широкого спектра спиновых концентраций: $p = 1.0$, 0.95, 0.8, 0.6, 0.5. Показано, что в таких системах пиннинг доменных стенок на дефектах структуры при старте из низкотемпературного состояния приводит к существенному изменению неравновесных эффектов "старения" и "памяти" по сравнению с "чистой" системой. В результате в долговременном режиме на временах $t - t_w \gg t_w \gg 1$ выявлено аномально сильное замедление корреляционных эффектов. Показано, что спадание автокорреляционной функции со временем в нарушение скейлинговой зависимости осуществляется по степенному закону критической релаксации намагниченности. В итоге предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ для структурно неупорядоченных систем с $p < 1$ становится равным нулю, в то время как для "чистой" системы $X^\infty = 0.784(5)$. Выделен неравновесный критический этап "сверхстарения" с показателем $\mu = 2.30(6)$ для слабо неупорядоченных и $\mu = 2.80(7)$ для сильно неупорядоченных систем.

DOI: 10.7868/S0370274X15150072

Коллективное поведение макроскопических систем вблизи температуры T_c фазового перехода второго рода характеризуется чрезвычайно медленной динамикой с аномально большими временами релаксации, стремящимися к бесконечности как $t_{\rm rel} \sim \sim |T - T_c|^{-z\nu}$ при $T \to T_c$, где z и ν – динамический критический индекс и индекс корреляционной длины соответственно. В результате статистическая система, находящаяся в критической точке, не способна придти к равновесному состоянию в течение всего процесса релаксации. В этих условиях система демонстрирует ряд особенностей своего неравновесного поведения, таких как явления старения и памяти о начальных состояниях, а также нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [1, 2]. Эффекты старения наблюдаются только на временах $t \ll t_{\rm rel}$ и проявляются в форме двухвременной зависимости корреляционной функции и функции отклика от времени наблюдения t и времени ожидания t_w. Время ожидания t_w характеризует промежуток от момента приготовления образца до момента начала измерения его характеристик. При медленной эволюции из неравновесного начального состояния старение системы проявляется в замедлении релаксационных процессов при увеличении времени ожидания t_w ("возраста" системы) и сопровождается такими неэргодическими эффектами, как память о начальном и любом промежуточном состояниях в релаксационном процессе при $t, t_w \ll t_{\rm rel}$ и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы [3].

В исследованиях влияния начальных состояний системы на характеристики неравновесного критического поведения различают высокотемпературные состояния, созданные при $T_0 > T_c$ и характеризуемые начальной намагниченностью $m_0 = 0$, и низкотемпературные состояния с $T_0 < T_c$ и $m_0 \neq 0$. Реализация неравновесного процесса осуществляется следующим образом. В начальный момент времени система приводится в контакт с термостатом при критической температуре T_c системы. Затем с момента времени t_w проводится измерение двухвременных величин – корреляционной функции и функции отклика – на временах $1 \ll t, t_w \ll t_{\rm rel}$. К настоящему времени исследование неравновесного критического поведения различных статистических систем наиболее полно проведено для случая их эволюции из высокотемпературного начального состояния (см. обзор [2]). В ряде работ [4–6] было осуществлено числен-

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

ное исследование методами Монте-Карло влияния дефектов структуры на особенности неравновесного поведения трехмерной модели Изинга при ее релаксации из высокотемпературного начального состояния. Изучены эффекты старения. Проведен расчет новой универсальной характеристики неравновесного критического поведения – предельного значения флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО) X^∞. Выявлена их зависимость от изменения концентрации дефектов. Однако случай неравновесной критической релаксации систем из низкотемпературного начального состояния исследован заметно хуже.

В работе [7] авторами на основе ренормгруппового анализа неравновесной динамики диссипативной модели А в классификации Гальперина–Хоэнберга [8] было показано, что начальное состояние с намагниченностью $m_0 \neq 0$ приводит к появлению нового временного масштаба $t_m \sim m_0^{-k}$ с показателем $k > 0$, существенно влияющего на временное поведение автокорреляционной функции и функции отклика. Описаны предельные режимы: режим с временами $t_w < t \ll t_m$, который всегда реализуется для случая высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0$ и характеризуется соответствующим этому начальному состоянию временным поведением корреляционной функции и функции отклика, а также режим с большими по сравнению с t_m временами t и t_w, т.е. $t_m \ll t_w < t$. В последнем случае, соответствующем, например, приведенной начальной намагниченности системы с $m_0 = 1$ при $T_0 = 0$, долговременное поведение корреляционной функции и функции отклика характеризуется новыми показателями и новым значением предельного ФДО X^∞. В работе [7] результаты ренормгруппового описания были дополнены расчетом характеристик неравновесной критической динамики диссипативной модели с помощью метода ε-разложения. Затем предсказания теории были сопоставлены с результатами проведенного компьютерного моделирования неравновесного критического поведения двумерной модели Изинга. Получено убедительное подтверждение их справедливости.

В данной работе мы впервые представляем результаты численного Монте-Карло-исследования влияния дефектов на характеристики неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга при ее эволюции из низкотемпературного начального состояния с начальной приведенной намагниченностью $m_0 = 1$. Ожидается, что происходящее в данном случае неравновесное изменение доменной структуры при переходе от однодоменного состояния при $T_0 = 0$ к многодоменной флуктуационной структуре, возникающей при критической температуре T_c, за счет пиннинга доменных стенок на дефектах структуры приведет не только к количественным, но и к существенным качественным изменениям характеристик неравновесного поведения структурно неупорядоченной модели Изинга по сравнению с поведением «чистой» модели.

Гамильтониан для ферромагнитной модели Изинга, разбавленной немагнитными атомами примеси, с учетом влияния внешнего магнитного поля h задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j - h \sum_i p_i S_i, \tag{1}$$

где $J > 0$ характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами $S_i = \pm 1$, зафиксированными в узлах решетки. В данной модели немагнитным атомам примеси сопоставляются пустые узлы. Числа заполнения p_i вводятся как случайные числа, принимающие значения 0 или 1: p_i принимается равным 1, если в узле i находится спин, и 0 в случае его отсутствия (магнитный атом замещен немагнитным атомом примеси). Дефекты структуры распределялись в системе каноническим образом в соответствии с функцией распределения $P(p_i) = (1-p)\delta(p_i) + p\delta(p_i)$, где $p = \langle p_i \rangle$ задает величину спиновой концентрации в системе. Положение дефектов структуры фиксировалось для отдельной примесной конфигурации. Моделирование проводилось на кубической решетке с наложенными периодическими граничными условиями. Величина $N_s = pL^3$ характеризует число спинов в решетке с линейным размером L.

В качестве характеристик неравновесного процесса выступают такие величины, как намагниченность

$$M(t) = \frac{1}{V} \int d^d x [\langle S(x,t) \rangle] = \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) \right\rangle \right], \tag{2}$$

временная корреляционная функция $C(t, t_w)$ и линейная функция $R(t, t_w)$ отклика на малое внешнее поле, приложенное в момент времени t_w. Две последние могут быть определены соотношениями

$$\begin{gathered} C(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \big[\langle S(x,t) S(x,t_w) \rangle - \\ - \langle S(x,t) \rangle \langle S(x,t_w) \rangle \big], \\ R(t, t_w) = \frac{1}{V} \int d^d x \left. \frac{\delta[\langle S(x,t) \rangle]}{\delta h(x, t_w)} \right|_{h=0}, \end{gathered} \tag{3}$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния, квадратные – усреднение по различным конфигурациям распределения дефектов в решетке.

Проведенное исследование неравновесной критической релаксации намагниченности $M(t)$ для "чистой" модели Изинга для различных начальных состояний m_0 (рис. 1) наглядно демонстрирует существенные как качественные, так и количественные отличия в релаксации намагниченности из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$, низкотемпературного полностью упорядоченного состояния с $m_0 = 1$ и промежуточного состояния с $m_0 = 0.4$. Так, для случая высокотемпературного начального состояния с $m_0 = 0.02 \ll 1$ на этапе неравновесной эволюции наблюдается характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом $m(t) \sim t^{\theta'}$ с $\theta' = 0.111(4)$, где θ' – независимый динамический критический индекс [9–11]. При временах $t > t_{cr} \sim m_0^{-1/(\theta'+\beta/z\nu)}$ данный этап эволюции сменяется режимом, характеризуемым 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, 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 $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$ со значением показателя $\beta/\nu z = 0.241(8)$. Промежуточный случай с $m_0 = 0.4$ характеризуется коротким этапом роста намагниченности по закону $m(t) \sim t^{\theta'}$ с последующим переходом к более длительному этапу релаксации по закону $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. Таким образом, процесс неравновесной критической релаксации намагниченности $M(t)$ из высокотемпературного начального состояния является наиболее "быстрым" по сравнению с релаксацией из других начальных состояний с $m_0 \neq 0$.

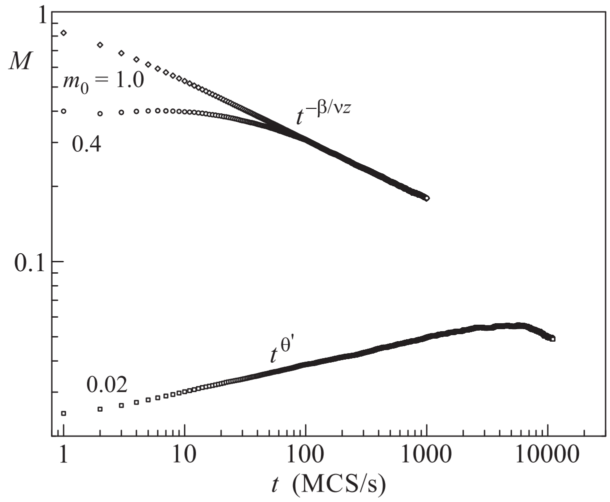

Рис. 1. Неравновесная критическая релаксация намагниченности $M(t)$ из различных начальных состояний: низкотемпературного состояния с $m_0 = 1$, промежуточного состояния с $m_0 = 0.4$ и высокотемпературного состояния с $m_0 = 0.02 \ll 1$

Переходя к анализу свойств автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и функции отклика $R(t, t_w)$, отметим, что согласно общим представлениям о неравновесных процессах для времен $t > t_w \gg t_{\rm rel}$ ожидается $C(t, t_w) = C^{eq}(t - t_w)$ и $R(t, t_w) = R^{eq}(t - t_w)$, где C^{eq} и R^{eq} – соответствующие равновесные величины, связанные флуктуационно-диссипативной теоремой (ФДТ): $TR^{eq}(t) = -dC^{eq}(t)/dt$. Принципиально важным проявлением медленной динамики служит нарушение ФДТ [12–14], когда связь функции отклика системы на внешнее возмущение $R(t, t_w)$ и корреляционной функции $C(t, t_w)$ осуществляется через введение дополнительной величины $X(t, t_w)$, получившей название флуктуационно-диссипативного отношения (ФДО):

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

Для времен $t > t_w \gg t_{\rm rel}$ ФДТ устанавливает $X(t, t_w) = 1$. Однако в общем случае для времен $t, t_w \ll t_{\rm rel}$ $X(t, t_w) \neq 1$. Асимптотическое значение ФДО, вводимое как

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

оказывается важной универсальной характеристикой неравновесных процессов в различных системах.

В настоящее время установлено, что временные зависимости автокорреляционной функции и функции отклика в неравновесном режиме при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 \neq 0$ удовлетворяют следующим выражениям [7]:

$$C(t, t_w, t_m) = \\ = A_C (t - t_w)^{a+1-d/z} \, (t/t_w)^{\theta - 1} \, F_C(t_w/t, t/t_m),$$

$$R(t, t_w, t_m) = A_R (t - t_w)^{a-d/z} \, (t/t_w)^{\theta} \, F_R(t_w/t, t/t_m), \quad (6)$$

где, как упоминалось выше, $t_m = B_m m_0^{-k}$ – новый временной масштаб, задаваемый начальным значением намагниченности, с показателем $k = 1/[\theta + a + \beta/(\nu z)] > 0$, $a = (2 - \eta - z)/z$, $\theta = \theta' - (2 - z - \eta)/z$. Скейлинговые функции $F_C(t_w/t, t/t_m)$

и $F_R(t_w/t, t/t_m)$ являются конечными при $t_w \to 0$ и $t/t_m \to 0$, A_R и A_C – неуниверсальные амплитуды, значения которых фиксируются условием $F_{C,R}(0,0) = 1$.

Величины $C(t, t_w, t_m)$ и $R(t, t_w, t_m)$ являются обобщенно однородными функциями трех временных масштабов: $t - t_w$, t_w и t_m. В частности, когда реализуется следующее их соответствие: $t_w < t \ll t_m$, которое всегда выполняется для случая эволюции из высокотемпературного состояния с $m_0 = 0$, зависимости (6) для C и R переходят в соотношения, отвечающие этому случаю [2, 6]. В противоположном случае с временами $t - t_w$ и t_w, большими t_m, т.е. для $t_m \ll t_w < t$, скейлинговые выражения (6) принимают вид

$$C(t,t_w) = \bar{A}_C (t-t_w)^{a+1-d/z} \, (t/t_w)^{\bar{\theta}-1} \, \bar{F}_C(t_w/t),$$
$$R(t,t_w) = \bar{A}_R (t-t_w)^{a-d/z} \, (t/t_w)^{\bar{\theta}} \, \bar{F}_R(t_w/t), \quad (7)$$

где введен новый показатель $\bar{\theta} = -\beta\delta/(\nu z) = -[1 + a + \beta/(\nu z)]$, а $\bar{F}_{C,R}$ являются универсальными скейлинговыми функциями, получающимися из $F_{C,R}(t_w/t, t/t_m)$ в (6) при предельно больших значениях переменной t/t_m.

В режиме старения, реализующемся для времен $t - t_w \sim t_w \gg t_m$, корреляционная функция и функция отклика описываются соотношениями

$$C(t,t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} \tilde{F}_C(t/t_w),$$
$$R(t,t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)-1} \tilde{F}_R(t/t_w) \quad (8)$$

со скейлинговыми функциями $\tilde{F}_{C,R}(t/t_w)$, которые убывают на долговременном этапе их изменения с $t - t_w \gg t_w \gg t_m$ в соответствии со степенным законом

$$\tilde{F}_{C,R}(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-\phi}, \quad (9)$$

где показатель $\phi = d/z - a + \beta\delta/(\nu z)$ [7]. Отметим, что при неравновесной критической эволюции из высокотемпературного начального состояния с $m_0 \ll 1$ скейлинговые функции $\tilde{F}_{C,R}(t/t_w)$ характеризуются значительно более медленным убыванием с показателем $c_A = c_R = d/z - \theta'$ [4]. Так, для “чистой” трехмерной модели Изинга показатели c_A и c_R принимают значения $c_A = 1.362(19)$ [15] и $c_R = 1.357(18)$ [4], в то время как ниже будет показано, что показатель для автокорреляционной функции $\phi_c = 2.742(32)$, а для восприимчивости $\phi_\chi = 2.756(56)$.

Для выявления особенностей неравновесного критического поведения в трехмерной системе изинговских спинов при эволюции из низкотемпературного начального состояния с $m_0 = 1$ и исследования влияния на них дефектов структуры в данной работе осуществлялось компьютерное моделирование в рамках статистического метода Монте-Карло. Был реализован динамический процесс односпиновых переворотов с применением алгоритма тепловой бани [16], который задает вероятность перехода $S_i \to S_i'$ спина системы в новое состояние посредством формулы

$$W_{sp}\,(S_i \to S_i') = \frac{\exp\left[-H(S_i')/T\right]}{\sum_{S_j} \exp\left[-H(S_j)/T\right]}, \quad (10)$$

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_s последовательных переворотов спинов в узлах решетки. Для модели Изинга с двумя возможными состояниями, $S_j = \pm 1$, указанную вероятность переворота можно записать в виде

$$W_{sp} = \frac{\exp\left[-H(S_i')/T\right]}{\exp\left[H(S_i)/T\right] + \exp\left[-H(S_i)/T\right]} \quad (11)$$

с реализацией так называемой глауберовской динамики.

В данной работе по аналогии с работами [4, 7] мы применили методику, позволяющую рассчитать функцию отклика без применения внешнего магнитного поля. Осуществлялся расчет обобщенной восприимчивости в виде интегральной функции отклика (термостатической восприимчивости)

$$\chi(t,t_w) = \int_0^{t_w} dt' \, R(t,t') =$$
$$= \frac{1}{TN} \sum_{i=1}^{N} \Big[\Big\langle p_i S_i(t) \Delta S_i(t_w) \Big\rangle \Big]. \quad (12)$$

Функция отклика задавалась соотношением (3), а функция $\Delta S_i(t_w)$ рассчитывалась при моделировании состояний системы от начального момента времени $t = 0$ до времени ожидания t_w и определялась соотношением

$$\Delta S_i(t_w) = \sum_{s=0}^{t_w} [S_i(s) - S_i^W(s)], \quad (13)$$

где $S_i^W = \mathrm{th}(J \sum_{m \neq i} p_m S_m / T)$.

С другой стороны, если в (12) для функции отклика применить соотношение (4), то можно получить

$$T\chi(t,t_w) = \int_0^{t_w} X(t,t') \frac{\partial C(t,t')}{\partial t'} dt' = \int_0^{C(t,t_w)} X(C) dC. \quad (14)$$

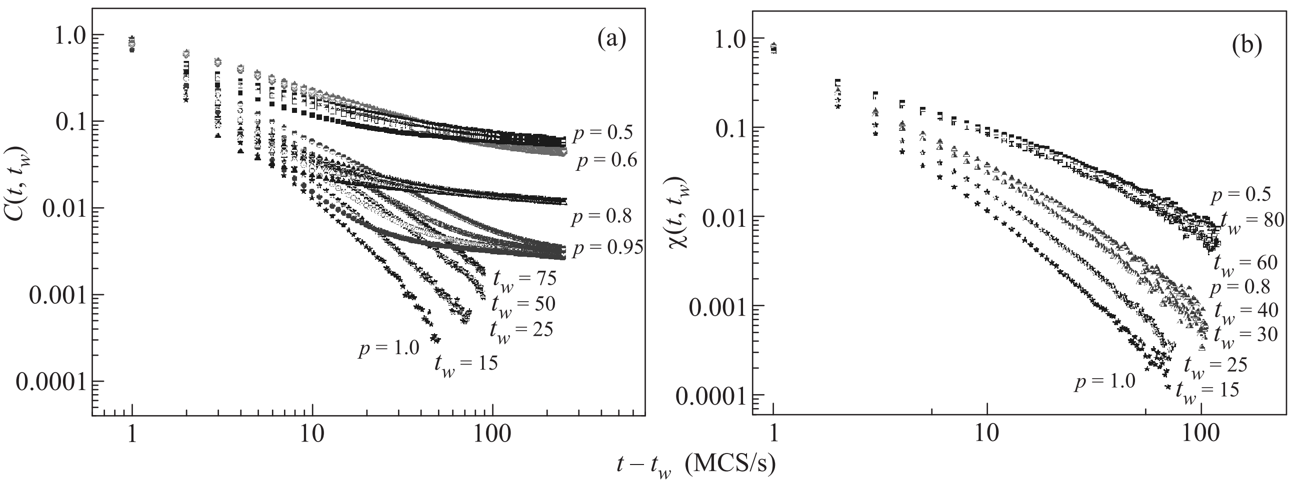

Рис. 2. Неравновесные зависимости автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ (a) и динамической восприимчивости $\chi(t,t_w)$ (b) от времени ожидания $t-t_w$ для различных значений концентрации спинов p и времен ожидания t_w

В результате флуктуационно-диссипативное отношение может быть определено как

$$X(t,t_w) = \lim_{C\to 0} T \frac{\partial \chi(t,t_w)}{\partial C(t,t_w)}, \qquad (15)$$

откуда можно определить предельное флуктуационно-диссипативное отношение (5).

Нами было осуществлено моделирование систем со спиновыми концентрациями $p = 1.0$, 0.95, 0.8, 0.6, 0.5 на кубической решетке с линейным размером $L = 128$ при соответствующих критических температурах $T_c(p)$: $T_c(1.0) = 4.5114(1)$ [17]; $T_c(0.95) = 4.26267(4)$; $T_c(0.8) = 3.4995(2)$; $T_c(0.6) = 2.4241(1)$; $T_c(0.5) = 1.84509(6)$ [18]. На ранней стадии эволюции системы корреляционная длина еще достаточно мала и конечность размера моделируемой системы оказывается несущественной. Поэтому применение в исследованиях решетки с достаточно большим линейным размером $L = 128$ позволяет пренебрегать конечномерными эффектами по сравнению с их проявлением при моделировании равновесных критических явлений [18].

В работе было проведено вычисление двухвременной зависимости автокорреляционной функции $C(t,t_w)$ (3) и восприимчивости $\chi(t,t_w)$ (12) от времени наблюдения $t-t_w$ для набора различных времен ожидания t_w при заданных выше значениях спиновой концентрации p. Поведение систем исследовалось на временах до 10000 шагов Монте-Карло на спин. При моделировании "чистой" системы с $p = 1.0$ проводилось статистическое усреднение по 90000 прогонок. При моделировании структурно неупорядоченной модели Изинга усреднение вычисляемых величин проводилось по 6000 примесных конфигураций и 15 прогонкам для каждой примесной конфигурации. Результаты расчетов представлены на рис. 2a и b. Эффекты старения наглядно проявляются на зависимостях $C(t,t_w)$ и $\chi(t,t_w)$ от "возраста" системы t_w на временах наблюдения $t-t_w \sim t_w$ и характеризуются замедлением корреляции и релаксации системы с увеличением ее "возраста". Из представленных графиков также видно, что с ростом концентрации дефектов (уменьшением спиновой концентрации p) происходит усиление эффектов старения. Наиболее наглядно влияние дефектов проявляется в сильном замедлении эффектов корреляции в структурно неупорядоченных системах по сравнению с "чистой" системой. Мы связываем эти сильные изменения в поведении автокорреляционной функции с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры, происходящим при неравновесном изменении доменной структуры системы при переходе от однодоменного состояния при $T_0 = 0$ к многодоменной флуктуационной структуре, возникающей при критической температуре T_c. На это указывают представленные на рис. 3a и b графики для двух составляющих автокорреляционной функции в (3), $C_{ss}(t,t_w)$ и $C_{mm}(t,t_w)$, для "чистой" системы и системы со спиновой концентрацией $p = 0.5$ соответственно. Видно, что для "чистой" системы на временах наблюдения $t-t_w \geq t_w$ значения $C_{ss}(t,t_w)$ и $C_{mm}(t,t_w)$ начинают совпадать, что приводит к взаимной компенсации в полной автокорреляционной функции. В то же время для структурно неупорядоченных систем хотя графики для этих составляющих и сближаются на временах $t-t_w \geq t_w$ с параллельным дальнейшим изменением, полной компенсации их не происходит. Более того, с увеличением времени ожидания t_w и

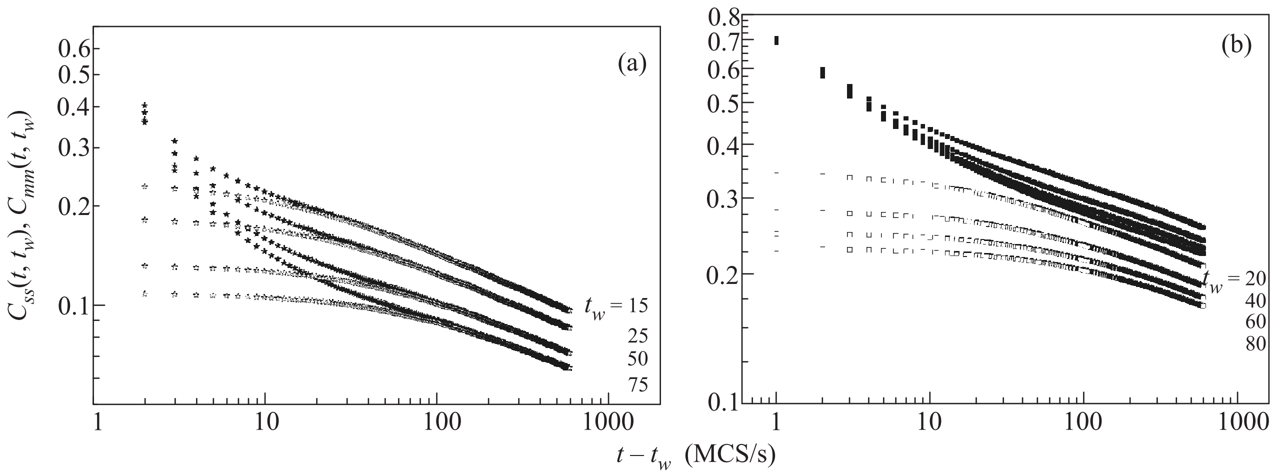

Рис. 3. Сравнение временных зависимостей вкладов в автокорреляционную функцию $C_{ss}(t,t_w) \sim [\langle S(t)S(t_w)\rangle]$ и $C_{mm}(t,t_w) \sim [\langle S(t)\rangle \langle S(t_w)\rangle]$ для концентраций спинов $p = 1.0$ (a) и 0.5 (b)

ростом концентрации дефектов $c_{\rm imp} = 1 - p$ их различие растет.

В режиме старения временная зависимость автокорреляционной функции характеризуется скейлинговыми соотношениями (8) и (9). Подобную скейлинговую форму для временной зависимости восприимчивости можно получить на основе применения интегрального соотношения (12) и скейлинговой зависимости (8) для функции отклика. В результате получаем

$$\chi(t, t_w) \sim t_w^{-2\beta/(\nu z)} \tilde{F}_\chi(t/t_w) \tag{16}$$

со степенной зависимостью функции $\tilde{F}_\chi(t/t_w) \sim \sim (t/t_w)^{-\phi}$ на долговременном этапе релаксации системы с $t - t_w \gg t_w \gg t_m$ при сохранении того же значения показателя ϕ, что и в соотношении (9).

Для подтверждения скейлинговых зависимостей автокорреляционной функции (8) и восприимчивости (16) было осуществлено построение зависимостей $t_w^{2\beta/(\nu z)} C(t, t_w)$ и $t_w^{2\beta/(\nu z)} \chi(t, t_w)$ от $(t - t_w)/t_w$ с использованием следующих значений критических индексов: $2\beta/\nu = 1.032(5)$ [19], $z = 2.024(6)$ [20] для $p = 1.0$, $2\beta/\nu = 1.016(32)$, $z = 2.191(21)$ [11] для $p = 0.95, 0.8$ и $2\beta/\nu = 0.924(80)$, $z = 2.663(30)$ [21] для $p = 0.6$, 0.5. Его результат приведен на рис. 4a и b, которые демонстрируют "коллапс" полученных для различных t_w данных на соответствующих разным спиновым концентрациям p универсальных кривых, характеризуемых скейлинговыми функциями $\tilde{F}_C(t/t_w)$ и $\tilde{F}_\chi(t/t_w)$. Для временных интервалов с $(t - t_w)/t_w \gg 1$ для "чистой" системы с $p = 1.0$ были определены показатели $\phi_c = 2.742(32)$ и $\phi_\chi = 2.756(56)$, которые в пределах погрешностей хорошо согласуются друг с другом и с теоретически предсказанным значением $\phi = 1 + d/z + \beta/(\nu z) = = 2.737(8)$. Однако для структурно неупорядоченных систем с $p < 1$ в значениях показателей для автокорреляционной функции и восприимчивости, определенных на интервале с $(t - t_w)/t_w \gg 1$, наблюдаются большие различия, обусловленные выявленным существенным влиянием дефектов структуры на корреляционные свойства системы на неравновесном этапе эволюции. Так, степенное поведение скейлинговой функции $\tilde{F}_C(t/t_w)$ для структурно неупорядоченных систем правильнее характеризовать показателем c_a:

$$\tilde{F}_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-c_a} \tag{17}$$

с $c_a = \beta/(\nu z)$, описывающим долговременную релаксацию намагниченности $M(t) \sim t^{-\beta/(\nu z)}$ при $T = T_c$. Действительно, определенные нами значения показателя c_a оказались равными $c_a = 0.232(7)$ для $p = = 0.95$, $c_a = 0.229(10)$ для $p = 0.8$, $c_a = 0.175(6)$ для $p = 0.6$, $c_a = 0.175(10)$ для $p = 0.5$. В пределах погрешности они хорошо согласуются со значениями $\beta/(\nu z)$ для соответствующих спиновых концентраций. В то же время для скейлинговой функции $\tilde{F}_\chi(t/t_w)$ вычисленные значения показателя, $\phi_\chi = 2.63(4)$ для $p = 0.95$, $\phi_\chi = 2.61(4)$ для $p = 0.8$, $\phi_\chi = 2.33(3)$ для $p = 0.6$, $\phi_\chi = 2.31(3)$ для $p = 0.5$, оказываются в хорошем согласии со значениями показателя $\phi = 1 + d/z + \beta/(\nu z)$ для соответствующих спиновых концентраций.

Тем не менее для структурно неупорядоченных систем в поведении автокорреляционной функции в режиме старения на временах $t - t_w \sim t_w$ наблюдается более резкое спадание (рис. 2a). Здесь поведение скейлинговой функции $\tilde{F}_C(t/t_w)$ (рис. 4a) может

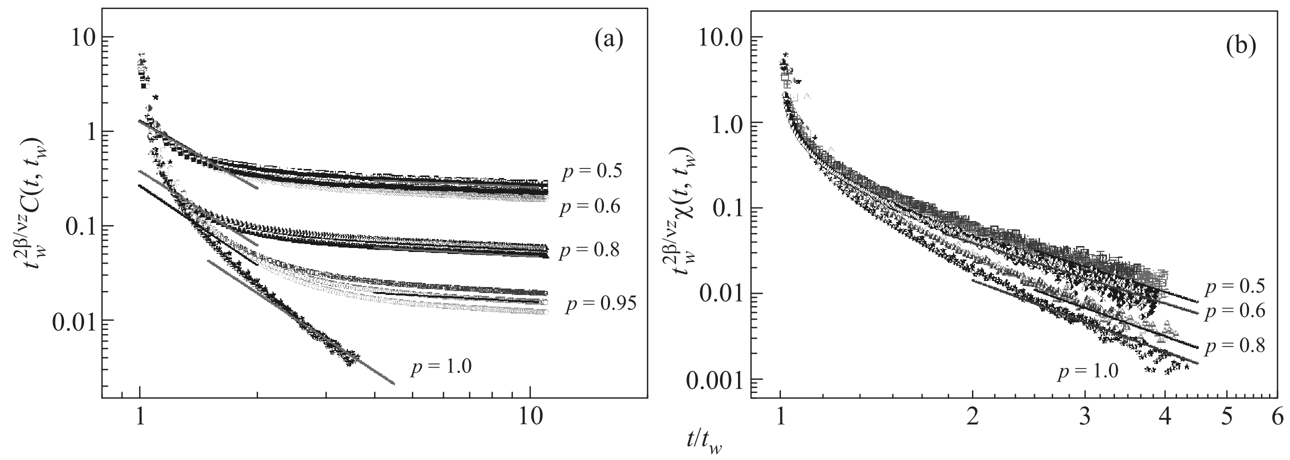

Рис. 4. Скейлинговые зависимости для автокорреляционной функции $t_w^{2\beta/(\nu z)}C(t,t_w)$ (a) и восприимчивости $t_w^{2\beta/(\nu z)}\chi(t,t_w)$ (b) от t/t_w, демонстрирующие "коллапс" полученных для различных t_w данных

быть аппроксимировано степенным законом с показателем ϕ_c, принимающим значения $\phi_c = 2.59(8)$ для $p = 0.95$, $\phi_c = 2.61(9)$ для $p = 0.8$, $\phi_c = 2.37(10)$ для $p = 0.6$, $\phi_c = 2.35(10)$ для $p = 0.5$. Эти значения в пределах погрешностей согласуются с вычисленными значениями ϕ_χ для динамической восприимчивости и значениями $\phi = 1 + d/z + \beta/(\nu z)$ для соответствующих спиновых концентраций. Таким образом, предсказываемое ренормгрупповой теорией скейлинговое поведение для корреляционной функции в соответствии с (7) проявляется в неравновесном поведении структурно неупорядоченных систем вплоть до режима старения с $t - t_w \sim t_w \gg 1$. В долговременном же режиме с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ за счет пиннинга доменных стенок на дефектах происходит сильное замедление корреляционных эффектов и спадание автокорреляционной функции со временем осуществляется по степенному закону критической релаксации намагниченности.

Более тонкий анализ поведения автокорреляционной функции для структурно неупорядоченных систем в долговременном режиме с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ показывает нарушение ее простой скейлинговой зависимости, определяемой $\tilde{F}_C(t/t_w)$, так как на этом этапе эволюции полного совпадения данных для различных t_w не происходит (рис. 4a). Представление скейлинговой зависимости для автокорреляционной функции в виде $\tilde{F}_C(t/t_w^\mu)$ позволяет при значениях показателя $\mu = 2.30(6)$ для систем с $p = 0.95$, 0.8 и $\mu = 2.80(7)$ для систем с $p = 0.6$, 0.5 получать совпадение данных для различных t_w (рис. 5). Такой случай скейлинговой зависимости, характеризуемой показателем $\mu > 1$, классифицируется в теории неравновесных процессов как явление "сверхстарения" [1]. Из рис. 5 видно, что восстановление "коллапса" данных для автокорреляционной функции в долговременном режиме с $t - t_w \gg t_w \gg 1$ через введение скейлинговой функции $\tilde{F}_C(t/t_w^\mu)$ разрушает "коллапс" этих же данных для времен $t - t_w \le t_w$. Это позволяет нам предположить, что для структурно неупорядоченных систем должна реализовываться более сложная, чем в (7), форма скейлинговой зависимости автокорреляционной функции при $t_m \ll t_w < t$ вида

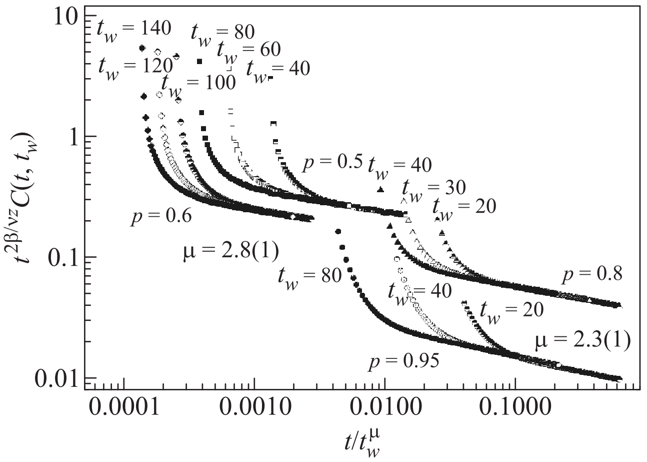

Рис. 5. Эффект "сверхстарения" в скейлинговом поведении автокорреляционной функции $t_w^{2\beta/\nu z}C(t,t_w)$ в зависимости от t/t_w^μ

$$C(t,t_w) = A_C(t-t_w)^{a+1-d/z}\Big[(t/t_w)^{\bar{\theta}-1}\bar{F}_C(t/t_w) + \\ + B_C(p)\tilde{F}_C(t/t_w^\mu)\Big] \tag{18}$$

с функциями $\bar{F}_C(t/t_w) \sim (t/t_w)^{-(\phi+\bar{\theta}-1)} \sim \sim (t/t_w)^{-2\beta/(\nu z)}$, $\tilde{F}_C(t/t_w^\mu) \sim (t/t_w^\mu)^{-\beta/(\nu z)}$ при $t - t_w \gg t_w \gg 1$ и $B_C(p=1) = 0$.

На следующем этапе исследований нами был проведен расчет флуктуационно-диссипативного отношения в соответствии с (15). Из представленных на рис. 6 зависимостей $T\chi$ от C видно, что для

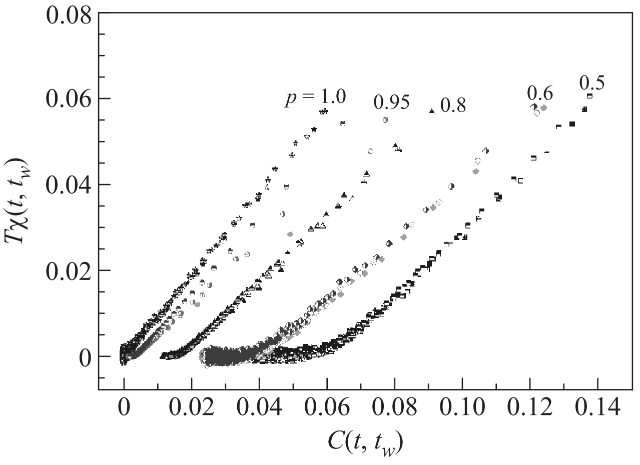

Рис. 6. Зависимости восприимчивости от автокорреляционной функции, определяющие в соответствии с (15) флуктуационно-диссипативное отношение, для различных спиновых концентраций p

"чистой" системы такая зависимость имеет линейный характер для временного интервала $t - t_w \geq$ $\geq t_w \gg 1$ изменения автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и характеризуется предельным значением ФДО $X^\infty = 0.784(5)$. Последнее было получено при проведении процедуры определения величин $X(t_w)$ на основе соотношения (15) для каждого значения времени ожидания t_w. Затем к полученным значениям $X(t_w)$ была применена аппроксимация $X(t_w \to \infty)$, которая и позволила определить искомое предельное флуктуационно-диссипативное отношение X^∞. Величина $X^\infty = 0.784(5)$ находится в очень хорошем согласии с теоретико-полевым значением $X^\infty \simeq 0.78$, полученным в работе [7] на основе ренормгруппового описания неравновесной критической динамики диссипативной модели A с применением метода ε-разложения. В случае эволюции из высокотемпературного начального состояния неравновесное критическое поведение трехмерной модели Изинга характеризуется существенно иным значением предельного флуктуационно-диссипативного отношения: $X^\infty = 0.380(13)$ [4]. Можно ожидать, что в случае других начальных состояний с $0 < m_0 < 1$ значения предельного флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ будут находиться в интервале от 0.380 до 0.784.

Однако для структурно неупорядоченных систем за счет выявленного сильного замедления корреляционных эффектов на временах $t - t_w \gg t_w \gg 1$ из-за пиннинга доменных стенок на дефектах на зависимостях $T\chi$ от C (рис. 6) имеются два линейных участка. Первый из них соответствует изменению автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ на временах $t - t_w \sim t_w \gg 1$, а второй – значениям $C(t, t_w)$ для долговременного этапа эволюции с $t - t_w \gg t_w \gg 1$. Видно, что протяженность второго участка растет с увеличением концентрации дефектов. Этим (вторым) участкам для всех рассмотренных спиновых концентраций с $p < 1$ соответствуют предельные значения ФДО $X^\infty = 0$. В то же время анализ зависимостей $T\chi$ от C на первых участках, осуществленный на основе выражения (15) без рассмотрения предела $C \to 0$, показывает, что если к определенным значениям $X(t_w)$ применить аппроксимацию $X(t_w \to \infty)$, можно получить значения $X(p = 0.95) = 0.740(6)$, $X(p = 0.8) = 0.736(6)$, $X(p = 0.6) = 0.726(8)$ и $X(p = 0.5) = 0.726(4)$, близкие к среднеполевым значениям предельного ФДО $X^\infty = 0.8$ [7]. Отклонения обусловлены влиянием флуктуационных эффектов и дефектов структуры.

В данной работе проведено также исследование эффектов памяти, проявляющихся, например, в двухвременном критическом поведении автокорреляционной функции (рис. 7) при "замораживании" системы в некоторый момент времени наблюдения $t_1 - t_w \sim t_w$ на величину $\Delta T = T_c - T_1 > 0$ в течение интервала времени $\Delta t = t_2 - t_1 = t_w \div 4t_w$ и последующем возвращении температуры системы к критической температуре T_c. Видно, что реакция системы на "замораживание" характеризуется начальным увеличением $C(t, t_w)$ по сравнению со значением при T_c. Затем идет процесс спадания автокорреляционной функции, соответствующий температуре "замораживания" $T_1 < T_c$. При возвращении же температуры системы к критической $C(t, t_w)$ стремится вернуться к значению, которое она имела в момент времени "замораживания" t_1. При раннем "замораживании" с $t_1 - t_w = t_w$ и достаточно большом интервале "замораживания" с $\Delta t = 4t_w$ (рис. 7a) пиннинг доменных стенок на дефектах препятствует полному возвращению "памяти" системы о ее состоянии в момент "замораживания". При увеличении начального момента "замораживания" с $t_1 - t_w = 2t_w$ и уменьшении интервала "замораживания" до $\Delta t = t_w$ наблюдается более полное восстановление "памяти" системы о состоянии в момент "замораживания" (рис. 7b). Мы связываем это как с более медленной динамикой системы в данном режиме с $t_1 - t_w > t_w$, так и с малостью интервала "замораживания", что затрудняет проявление необратимых эффектов в динамике доменных стенок.

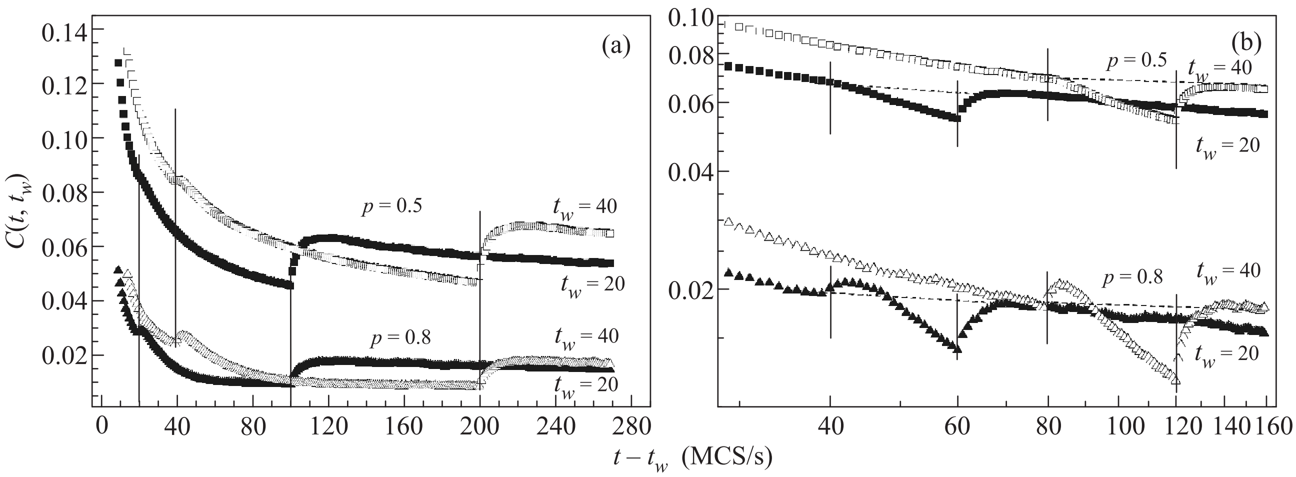

Рис. 7. Эффекты памяти в неравновесном критическом поведении автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ для неупорядоченных систем с $p = 0.8$ и 0.5 при их "замораживании" на величину $\Delta T = 1$ на различных временных этапах при $t_w = 20$ и 40: (a) – время "замораживания" $t_1 - t_w = t_w$, временной интервал "замораживания" $\Delta t = 4t_w$; (b) — $t_1 - t_w = 2t_w$, $\Delta t = t_w$

В заключение отметим, что в результате численных исследований выявлено существенное влияние дефектов на неравновесную критическую динамику трехмерной модели Изинга при ее эволюции из низкотемпературного состояния. Показано, что с ростом концентрации дефектов происходит усиление эффектов старения. Наиболее наглядно влияние дефектов проявляется в сильном замедлении эффектов корреляции в структурно неупорядоченных системах по сравнению с "чистой" системой. В результате спадание автокорреляционной функции на временах $t - t_w \gg t_w \gg 1$ осуществляется по степенному закону критической релаксации намагниченности за счет пиннинга доменных стенок на дефектах, а предельные значения ФДО, определяемые динамикой доменов в долговременном режиме, становятся равными нулю. Продемонстрированно, что критические показатели, определяющее асимптотическое поведение автокорреляционной функции и динамической восприимчивости, характеризуются принадлежностью к различным классам универсальности критического поведения: поведения "чистых", слабо неупорядоченных с $p = 0.95$, 0.8 и сильно неупорядоченных с $p = 0.6$, 0.5 систем [5, 6, 22]. Проведено исследование неравновесных эффектов памяти при резком "замораживании" системы в режиме старения и последующем возвращении ее температуры к критической. Показано, что пиннинг доменных стенок на дефектах препятствует полному возвращению "памяти" системы о ее состоянии в момент "замораживания".

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 14-12-00562). Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. M. Henkel and M. Pleimling, *Non-Equilibrium Phase Transitions, Volume 2: Ageing and Dynamical Scaling far from Equilibrium (Theoretical and Mathematical Physics)*, Springer, Heidelberg (2010), p. 544.
2. P. Calabrese and A. Gambassi, J. Phys. A **38**, R133 (2005).
3. Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, УФН **183**, 617 (2013).
4. П. В. Прудников, В. В. Прудников, Е. А. Поспелов, Письма в ЖЭТФ **98**, 693 (2013).
5. В. В. Прудников, П. В. Прудников, Е. А. Поспелов, ЖЭТФ **145**, 462 (2014).
6. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, E. A. Pospelov, and A. N. Vakilov, Phys. Lett. A **379**, 774 (2015).
7. P. Calabrese, A. Gambassi, and F. Krzakala, J. Stat. Mech. **6**, 2 (2006).
8. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
9. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, Z. Phys. B **73**, 539 (1989).
10. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И .А. Калашников, С. С. Циркин, ЖЭТФ **133**, 1251 (2008).
11. 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).
12. A. Crisanti and F. Ritort, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, R181 (2003).
13. L. F. Cugliandolo, J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 483001 (2011).

14. K. Komatsu, D. L'Hote, S. Nakamae, V. Mosser, M. Konczykowski, E. Dubois, V. Dupuis, and R. Perzynski, Phys. Rev. Lett. **106**, 150603 (2011).
15. A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke, and B. Zheng, J. Phys. A **32**, 1395 (1999).
16. W. Janke, *Monte Carlo methods in classical statistical physics, in Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin (2008), v. 739, p. 79.
17. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).
18. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
19. R. Guida and J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31**, 8103 (1998).
20. А. С. Криницын, В. В. Прудников, П. В. Прудников, ТМФ **147**, 137 (2006).
21. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем*, Наука, М. (2013).
22. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, Д. В. Талашок, Письма в ЖЭТФ **100**, 760 (2014).