

Неравновесное критическое поведение сильно неупорядоченных магнетиков с дальнедействующей корреляцией дефектов

П.В. Прудников, М.А. Медведева

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

E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

Статья поступила в редакцию 13 ноября 2013 г., после переработки 2 декабря 2013 г.

Проведено исследование методами Монте-Карло неравновесного критического поведения сильно неупорядоченных магнетиков, описываемых трехмерной моделью Гейзенберга с протяженными дефектами структуры. Рассчитаны значения критической температуры и критических показателей: $z = 3,529(125)$, $\nu = 0,821(14)$, $\beta = 0,777(53)$, $\omega = 0,882(49)$. Продемонстрировано, что сильно неупорядоченные гейзенберговские магнетики с дальнедействующей корреляцией дефектов относятся к отдельному классу универсальности. Показано, что присутствие высокой концентрации дефектов структуры с дальнедействующей корреляцией приводит к существенному замедлению критической релаксационной динамики. Проведено исследование эффектов старения в неравновесном поведении сильно неупорядоченных магнетиков.

Проведено дослідження методами Монте-Карло нерівноважної критичної поведінки сильно неупорядкованих магнетиків, що описуються тривимірною моделлю Гейзенберга з протяжними дефектами структури. Розраховано значення критичної температури та критичних показників: $z = 3,529(125)$, $\nu = 0,821(14)$, $\beta = 0,777(53)$, $\omega = 0,882(49)$. Продемонстровано, що сильно неупорядковані гейзенбергівські магнетики з далекодійною кореляцією дефектів відносяться до окремого класу універсальності. Показано, що присутність високої концентрації дефектів структури з далекодійною кореляцією призводить до істотного уповільнення критичної релаксаційної динаміки. Проведено дослідження ефектів старіння в нерівноважній поведінці сильно неупорядкованих магнетиків.

PACS: 68.35.Rh Фазовые переходы и критические явления;

75.40.Cx Статические свойства;

75.40.Mg Изучение на численных моделях.

Ключевые слова: фазовые переходы и критические явления, неупорядоченные магнетики, критическая динамика, методы Монте-Карло.

1. Введение

Представления теории фазовых переходов, хорошо разработанные для однородных систем, претерпевают сильные изменения при попытках их распространения на системы со структурным беспорядком. Так, до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения, как и критические показатели, универсальными, т.е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции, или осуществляется непрерывное изменение критических показателей с концентрацией. Поскольку возможности аналитического теоретического подхода ограничены описанием слабо неупорядоченных систем, исследование проблемы универсально-

сти критического поведения сильно неупорядоченных систем методами компьютерного моделирования имеет большее значение [1–6].

Смещение исследований в современной физике твердого тела в область микромасштабов вызвало необходимость понимания тонких явлений, связанных с наличием протяженных дефектов структуры типа дислокаций, границ зерен, примесных комплексов и т.д. Все эти особенности представляют собой проявление пространственно скоррелированных неоднородностей.

В силу этого к моделям систем с дальнедействующей корреляцией дефектов существует несомненный интерес как с общетеоретической точки зрения — выявления новых типов критического поведения, так и с точки зрения реальной возможности проявления даль-

нодействующей корреляции дефектов в полимерах [7], при переходе в сверхтекучее состояние ^4He в пористой среде — аэрогеле [8], в ориентационных стеклах [9], в неупорядоченных твердых телах с дефектами фракталоподобного типа [10] и при описании дислокаций на поверхности [11].

Известно, что в критической точке наряду с особенностями равновесных характеристик сингулярное поведение демонстрируют кинетические коэффициенты и динамические функции отклика, что обусловлено аномально большими временами релаксации сильно флуктуирующих величин. Однако исследование динамических свойств критических флуктуаций сталкивается с трудностями более сложными, чем при описании равновесных характеристик. Это вызвано необходимостью учета взаимодействия флуктуаций параметра порядка с другими долгоживущими возбуждениями. В этом плане динамическое критическое поведение модели Гейзенберга значительно менее изучено по сравнению с исследованиями статических свойств [12]. Модель Гейзенберга, описывающая важный класс изотропных магнетиков, является наиболее распространенной моделью при описании реальных магнетиков. Фактически, анизотропный вариант модели Гейзенберга используется для описания таких сплавов, как K_2NiF_4 [13], $\text{BaCO}_2(\text{AsO}_4)_2$ [14], $\text{CoCl}_2\text{-GIC}$ [15] и Rb_2CrCl_4 [16].

При исследовании неравновесных свойств гейзенберговских магнетиков наличие дальнедействующей корреляции дефектов может привести к проявлению эффектов старения и нарушению флуктуационно-диссипативного отношения [17–19].

В настоящей работе изучено влияние неравновесных начальных состояний на релаксационные процессы в ферромагнитной сильно неупорядоченной системе в критической точке. Известно, что аномальные особенности в явлениях критической динамики определяются прежде всего эффектами дальнедействующей корреляции долгоживущих флуктуаций ряда термодинамических переменных. В связи с этим фундаментальный интерес представляет исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния в сильно коррелированное состояние при критической температуре.

На основе ренормгруппового анализа в работе [20] было показано, что после микроскопически малого времени t_{mic} для k -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма:

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

где t — время, $\tau = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура, L — линейный размер решетки, m_0 — начальное значение намагниченности, b — произволь-

ный масштабный фактор; θ' — новый независимый критический индекс.

Начальное состояние системы выбирается обычно либо с $m_0 \ll 1$, либо с $m_0 = 1$. Исследования показывают, что динамический процесс, начинающийся с полностью упорядоченного состояния ($m_0 = 1$), более предпочтителен из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты. Более того, в этом случае не возникает зависимости от нового критического индекса θ' . В настоящей работе было проведено моделирование из начального состояния с $m_0 = 1$, что соответствует низкотемпературному пределу $T \rightarrow 0$.

Представленная статья имеет следующую структуру: в разд. 2 описана трехмерная неупорядоченная модель Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов структуры и указаны условия проведенного численного моделирования. В разд. 3 представлены результаты моделирования неравновесного критического поведения сильно неупорядоченной системы из начального низкотемпературного состояния. В разд. 4 — результаты влияния дефектов структуры на неравновесные эффекты старения. В разд. 5 сделаны заключительные выводы.

2. Описание модели и параметры моделирования

В данной работе впервые исследовано критическое поведение трехмерной сильно неупорядоченной спиновой системы с линейными дефектами структуры, описываемой моделью Гейзенберга, с гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} p_i p_j \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (2)$$

где $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ — трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i — случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ($p_i = 1$, когда узел i занят спином, и $p_i = 0$, когда узел пуст). Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной $p = 0,60$.

Исследована модель Вейнриба–Гальперина с так называемой дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов [21], когда парная корреляционная функция $g(x - y)$ спадает с расстоянием по степенному закону $g(x - y) \sim |x - y|^{-a}$, где a — параметр корреляции дефектов структуры. Критическое поведение неупорядоченной системы с точечными некоррелированными дефектами структуры может быть описано моделью Вейнриба–Гальперина с параметром корреляции $a = 3$. При наличии в системе протяженных дефектов — дислокаций или плоскостей, ориентированных случайным образом, ее критическое поведение может быть также описано в рамках модели Вейнриба–Гальперина при значениях параметра корреляции $a = d - 1$ или $a = d - 2$,

где d — размерность системы. Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем $a = 2$. Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений подерживалось одинаковым.

Методика вычисления для расчета критической температуры с использованием кумулянтов Биндера [22] и пересечения ξ/L [23] для слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с концентрацией спинов $p = 0,80$ была отработана в работе [24] и показала хорошие и надежные результаты. Поэтому в данной работе для вычисления критической температуры сильно неупорядоченной модели, $p = 0,60$, применялась та же методика, но с кластерным алгоритмом, модифицированным для моделирования низкотемпературного поведения систем. Выражение для кумулянта Биндера можно представить в виде

$$U_4 = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle m^{(4)} \rangle]}{[\langle m^{(2)} \rangle]^2} \right), \quad (3)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение, а скобки $[\dots]$ — усреднение по различным конфигурациям примеси.

Для неупорядоченных систем вычисление k -го момента намагниченности $m^{(k)}(t)$ осуществляется в виде

$$m^{(k)}(t) = \left\langle \left[\frac{1}{(N_s)^k} ((\sum_i^{N_s} p_i S_i^x)^2 + (\sum_i^{N_s} p_i S_i^y)^2 + (\sum_i^{N_s} p_i S_i^z)^2)^{k/2} \right] \right\rangle, \quad (4)$$

где $N_s = pL^3$. Кумулянт $U_4(L, T)$ имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму:

$$U_4(L, T) = u(L^{1/\nu}(T - T_c)), \quad (5)$$

не содержащую мультипликативной зависимости от линейного размера решетки L . Данная скейлинговая зависимость кумулянта позволяет определять критическую температуру $T_c(L \rightarrow \infty)$ через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость $U_4(L, T)$ для различных L . Более того, в критической области при $T \rightarrow T_c$

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{1/\nu}, \quad (6)$$

и, следовательно, по максимальному наклону кумулянтов, соответствующих различным L в пределе $L \rightarrow \infty$, вблизи точки их пересечения можно определить критический индекс корреляционной длины ν .

Расчет корреляционной длины ξ осуществляется в соответствии со следующими соотношениями:

$$\xi = \frac{1}{2 \sin(\pi/L)} \sqrt{\frac{\chi_L}{F} - 1}, \quad (7)$$

$$\chi_L = \overline{\langle m^{(2)} \rangle} / pL^3, \quad (8)$$

где F определяется через фурье-образ намагниченности [25]

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}, \quad (9)$$

$$F = \frac{V}{3} \langle |G(2\pi/L, 0, 0)|^2 + |G(0, 2\pi/L, 0)|^2 + |G(0, 0, 2\pi/L)|^2 \rangle, \quad (10)$$

где $\langle \dots \rangle$ обозначает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта сверху — усреднение по конфигурациям примеси.

Для уменьшения эффектов критического замедления используют кластерные алгоритмы Вольфа [26] или Свендсена–Ванга [27]. Отличие этих алгоритмов заключается в том, что в случае однокластерного алгоритма Вольфа строится кластер, который переворачивается с вероятностью, равной 1, а в случае многокластерного алгоритма Свендсена–Ванга система разбивается на множество кластеров, каждый из которых переворачивается с вероятностью 1/2. На рис. 1 представлены примеры выращивания кластера однокластерным алгоритмом Вольфа и многокластерным алгоритмом Свендсена–Ванга для однородной двумерной модели Изинга. В ходе численных исследований установлено, что наличие дефектов структуры большой концентрации приводит к существенному понижению критической температуры, так что однокластерный алгоритм Вольфа становится не применим, так как вероятность переворота кластера значительно уменьшается в низкотемпературной области. Кластерный алгоритм моделирования должен обязательно модифицироваться многокластерным алгоритмом Свендсена–Ванга:

1. Выбирается случайный единичный вектор \mathbf{r} .
2. Просматриваются все nn -состояния $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$. Если \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j сонаправлены (лежат по одну сторону от плоскости, перпендикулярной направлению \mathbf{r} , т.е. если $(\mathbf{S}_i \mathbf{r})(\mathbf{S}_j \mathbf{r}) > 0$), то создается связь между этими узлами с вероятностью $1 - \exp[-2J(\mathbf{S}_i \mathbf{r})(\mathbf{S}_j \mathbf{r})/T]$.
3. Создаются кластеры: набор узлов, соединенных связями.

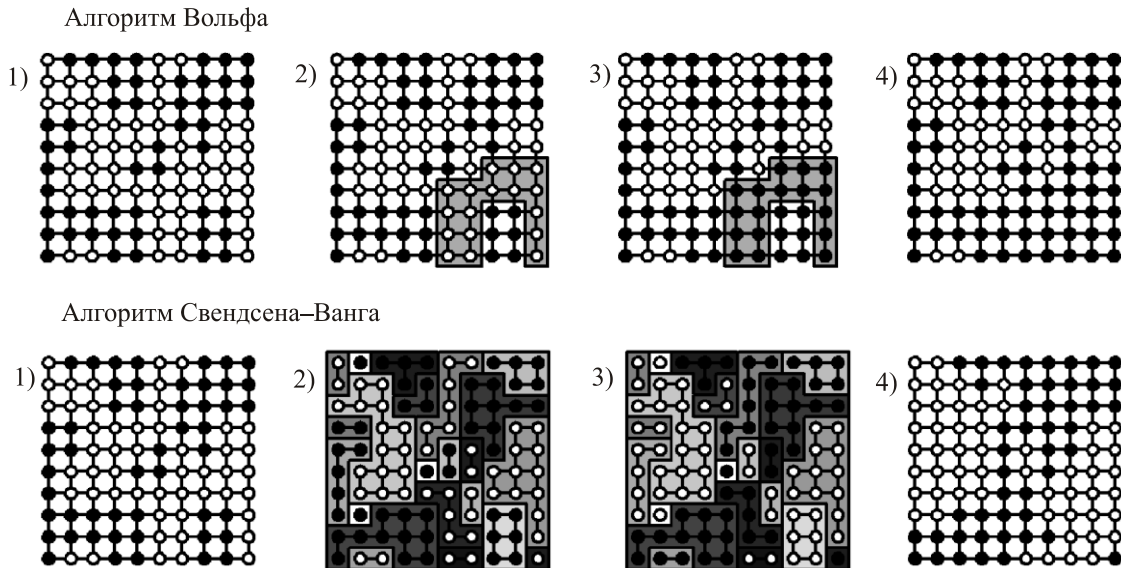


Рис. 1. Примеры выращивания кластера однокластерным алгоритмом Вольфа и многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга для двумерной модели Изинга: • — спин направлен вверх, о — спин направлен вниз.

4. Каждый кластер переворачивается с вероятностью $1/2$. Таким образом, каждый спин в кластере меняет свое значение следующим образом: $S_i = S_i - 2(S_i \mathbf{r})$.

Однако перед переворотом всех кластеров каждый из них должен быть распознан. Для этой цели был использован оптимизированный алгоритм поиска Хошена-Копельманна [28]: каждому спину в кластере присвоено целое число, в качестве метки для кластера выбирается наименьшее из этих чисел.

На первом этапе для оценки значения критической температуры была рассчитана температурная зависимость восприимчивости

$$\chi \sim \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \quad (11)$$

для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$. По положению максимума температурной зависимости восприимчивости на рис. 2 оценена область значений критической температуры $T_c \approx 0,90$ в единицах обменного интеграла. Для уточнения значения критической температуры были рассчитаны температурные зависимости кумулянта Биндера и отношения ξ/L для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$, изображенные на рис. 3.

Представленные на рис. 3 зависимости были получены усреднением по 2100 конфигурациям примеси для $L = 32$, по 1100 для $L = 48$ и по 400 для $L = 64$, для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонкам. Для расчета одной конфигурации для системы с линейным размером $L = 64$ на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного программирования требуется порядка 100 часов машинного времени. Произведена оценка времени счета одной конфигурации для более крупных решеток. Для $L = 96$ требуется 240 ч и для

$L = 128$ требуется 670 ч (примерно один месяц вычислений). Такое время счета значительно усложняет расчет критического поведения характеристик для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга по сравнению со слабо неупорядоченной моделью Гейзенберга. Для решения данной проблемы при расчете конфигурации примеси для $L = 96$ и $L = 128$ каждая статистическая прогонка рассчитывалась на отдельном процессорном элементе.

Через координату точки пересечения кривых $U_4(L, T)$ и $\xi/L(L, T)$, представленных на рис. 3, определены значения критической температуры $T_c = 0,887(5)$ и $T_c = 0,889(2)$ соответственно. В качестве итогового значения критической температуры взято среднее значение $T_c = 0,888(5)$. Используя выражение (6), были получены значения критического индекса корреляционной длины ν для различных линейных

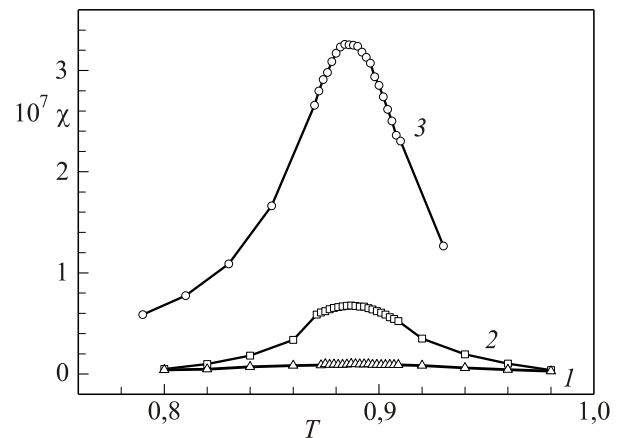


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости χ для различных линейных размеров решетки L : 32 (1), 48 (2) и 64 (3). T — в единицах объемного интеграла.

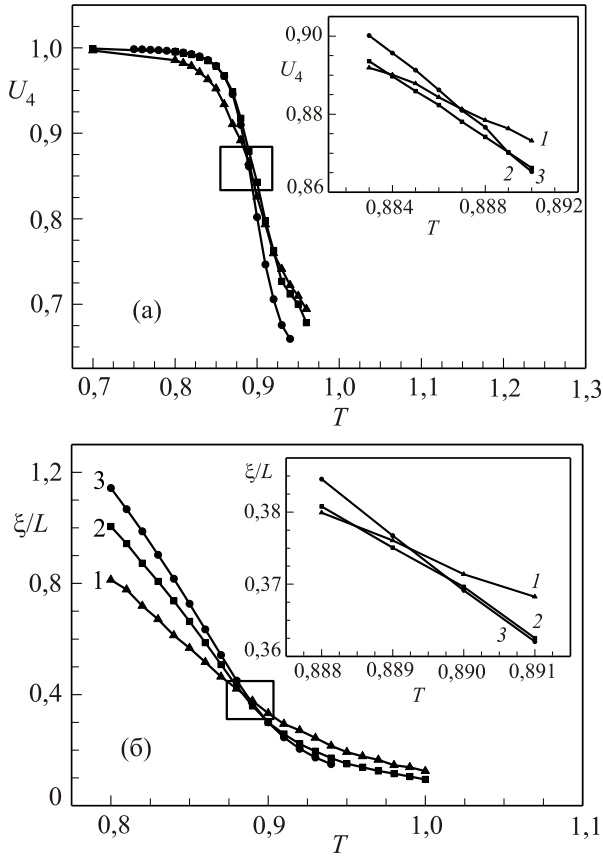


Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера U_4 (а) и отношения ξ/L (б) от температуры для разных линейных размеров решетки L : 32 (1), 48 (2) и 64 (3).

размеров $L = 32, 48, 64$ и для различных значений температуры выше критической. Известно, что фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц в ней стремится к бесконечности. Таким образом эффективное значение критического показателя может быть найдено в пределе $T \rightarrow T_c$ и $L \rightarrow \infty$. Реализация данной процедуры, представленной на рис. 4, для зависимости $\nu(T, L)$ позволяет рассчитать асимпто-

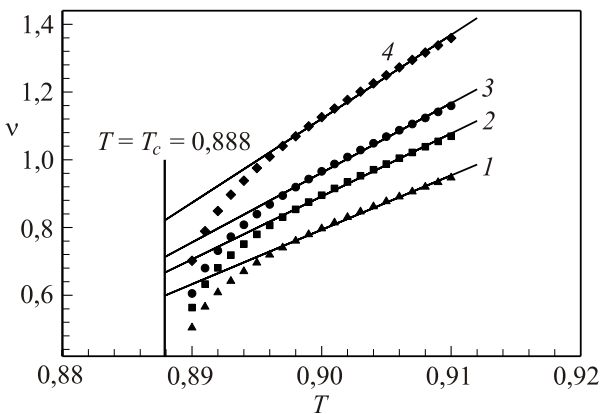


Рис. 4. Температурная зависимость показателя ν для разных L : 32 (1), 48 (2), 64 (3) и $L \rightarrow \infty$ (4).

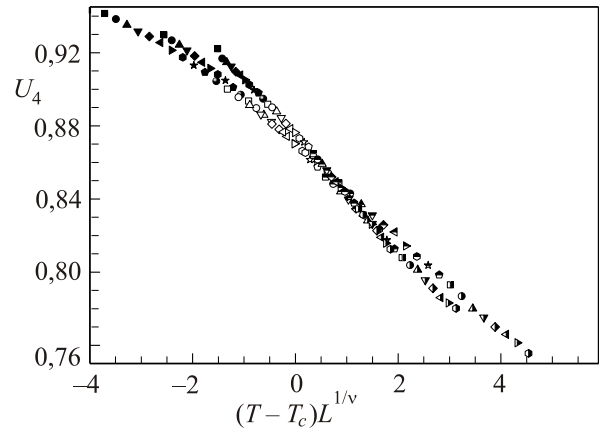


Рис. 5. Кумулянт U_4 для различных значений температур $T = 0,872-0,910$.

тическое значение индекса $\nu = 0,821(14)$. Построенная зависимость кумулянта U_4 от $(T - T_c)L^{1/\nu}$ для полученного значения ν , изображенная на рис. 5, демонстрирует достаточно хорошее выполнение скейлингового соотношения (5).

3. Исследование неравновесной критической релаксации из начального низкотемпературного состояния

Моделирование критического поведения системы взаимодействующих частиц методом Монте-Карло наталкивается на трудности, связанные в основном с явлением критического замедления, характеризующимся тем, что время релаксации системы, как и время корреляции состояний, неограниченно растет по мере приближения к критической температуре, и степенной характер их асимптотической зависимости от приведенной температуры определяется критическим индексом z :

$$\tau_{\text{rel}} \cdot \tau_{\text{corr}} \sim |T_c - T|^{-z\nu}. \quad (12)$$

Для структурно неупорядоченных систем эта проблема еще более существенна, так как их неравновесное критическое поведение определяется индексом z , принимающим бóльшие значения, чем для однородных систем. Для уменьшения эффектов влияния критического замедления применяют кластерные алгоритмы Вольфа или Свендсена-Ванга, но эти алгоритмы столь существенно меняют динамику системы по сравнению с алгоритмом Метрополиса, что для получения информации о характеристиках критической динамики их применять нельзя. В связи с этим в настоящей работе был применен метод коротковременной динамики для получения значений как динамического, так и статических критических индексов. Для моделирования неравновесного критического поведения был использован алгоритм Метрополиса [29]. Особенностью

данного метода является то, что информация об универсальном критическом поведении может быть получена на относительно малых макроскопических промежутках времени (до 2000 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s)) на ранней стадии развития системы в критической точке или ее окрестности [30,31].

При критической температуре $\tau = 0$ релаксация намагниченности характеризуется степенным законом:

$$m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (13)$$

Для независимого определения динамического критического индекса z исследована временная зависимость кумулянта Биндера второго порядка $U_2 = m^{(2)}/m^2 - 1$ со скейлинговой зависимостью:

$$U_2(t, L) \sim t^{d/z}, \quad (14)$$

где $d = 3$ — размерность системы.

На рис. 6 в двойном логарифмическом масштабе представлена временная зависимость кумулянта Биндера второго порядка для различных линейных размеров решетки $L = 64, 128$ при значении $T = T_c = 0,888$. Данные кривые получены усреднением по 100 конфигурациям примеси, для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонам. Используя выражение (14), получены значения показателей $d/z = 0,737(59)$ и $d/z = 0,737(84)$ для $L = 64$ и $L = 128$. Временные зависимости кумулянта $U_2(t)$ для различных L характеризуются одинаковыми значениями показателей. Следовательно, получать корректные значения критических индексов можно, исследуя критическое поведение системы с меньшим линейным размером решетки $L = 64$, что значительно упрощает исследовательский процесс. Для расчета одной конфигурации примеси на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного про-

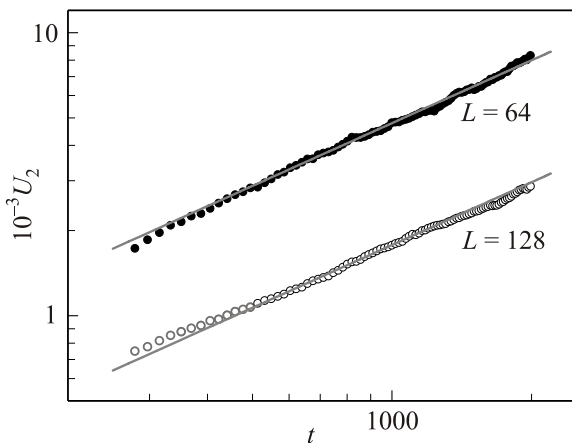


Рис. 6. Временная зависимость кумулянта U_2 для различных линейных размеров решетки $L = 64$ и 128 при значении $T = T_c = 0,888$.

граммирования для решетки с $L = 64$ требуется 3,5 ч и для решетки с $L = 128$ требуется 47 ч.

Временные зависимости намагниченности $m(t)$ и кумулянта Биндера второго порядка $U_2(t)$ представлены на рис. 7. Данные кривые получены усреднением по 1200 конфигурациям примеси, каждая из которых усреднялась по 25 прогонам. Значения показателей $\beta/\nu z = 0,176(4)$, $d/z = 0,691(30)$ и соответствующие им значения критических индексов $\beta/\nu = 0,765(42)$, $z = 4,343(188)$ получены с помощью линейной аппроксимации на интервале $t \in [260; 1330]$. Данный интервал выбран из минимума среднеквадратичной погрешности аппроксимации σ , изображенной на рис. 8.

Для учета влияния конечности моделируемых систем был осуществлен расчет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин. Для этого применялось следующее выражение для временной зависимости наблюдаемых величин $X(t)$:

$$X(t) = A_x t^\delta (1 + B_x t^{-\omega/z}), \quad (15)$$

где ω является критическим индексом поправки к скейлингу, A_x и B_x — коэффициенты разложения, и показатель $\delta = -\beta/\nu z$ в случае $X \equiv m(t)$, $\delta = d/z$ в случае $X \equiv U_2(t)$. При анализе полученных кривых

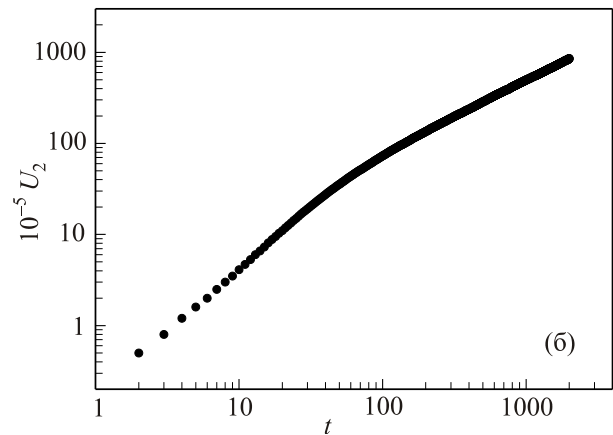
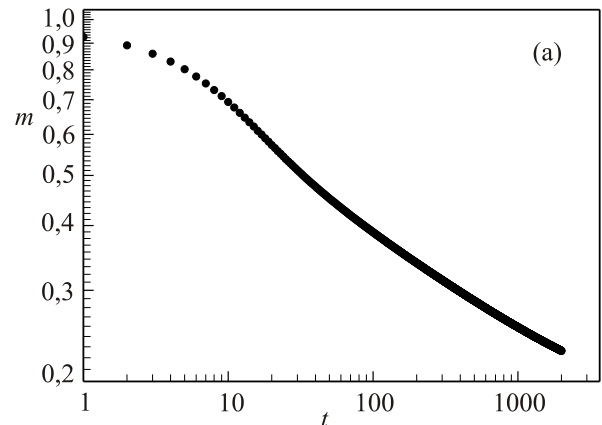


Рис. 7. Временная зависимость намагниченности $m(t)$ (а) и кумулянта Биндера $U_2(t)$ (б) для линейного размера решетки $L = 64$ при $T = T_c = 0,888$.

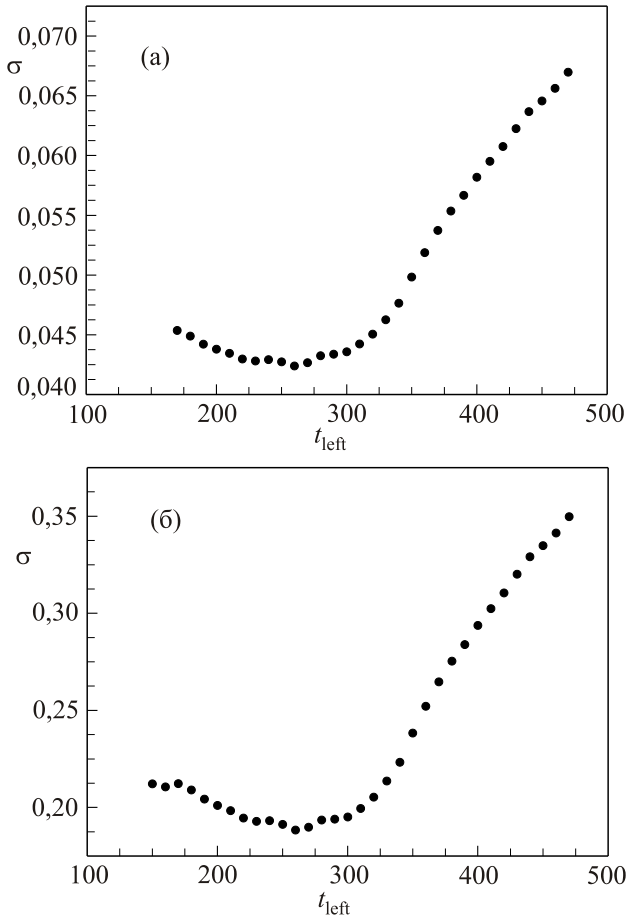


Рис. 8. Зависимость среднеквадратичной погрешности аппроксимации от выбора временного интервала $[t_{\text{left}}; 1330]$ для индексов β/v (а) и z (б).

использована схема линейной аппроксимации для зависимости $(Xt^{-\delta})$ от $t^{-\omega/z}$ при изменении значений показателя δ , а также критического индекса ω/z . На рис. 9 приведены значения среднеквадратичных погрешностей аппроксимации σ_δ исследуемых временных зависимостей намагниченности (рис. 9(а)) и кумулянта (рис. 9(б)) как функций показателей β/vz и d/z при различных значениях индекса ω/z . Наименьшее значение σ_δ принимает при $\omega/z = 0,25$. По минимуму σ_δ определены значения показателей $\beta/vz = 0,268(4)$ и $d/z = 0,850(30)$ и соответствующие им значения критических индексов $\beta/v = 0,946(48)$, $z = 3,529(125)$ (табл. 1).

4. Исследование эффектов старения в неравновесном критическом поведении сильно неупорядоченных магнетиков

Главной особенностью неравновесного поведения систем с медленной динамикой является нарушение трансляционной инвариантности во времени за счет долговременного влияния неравновесных начальных состояний таких систем. Это находит проявление прежде

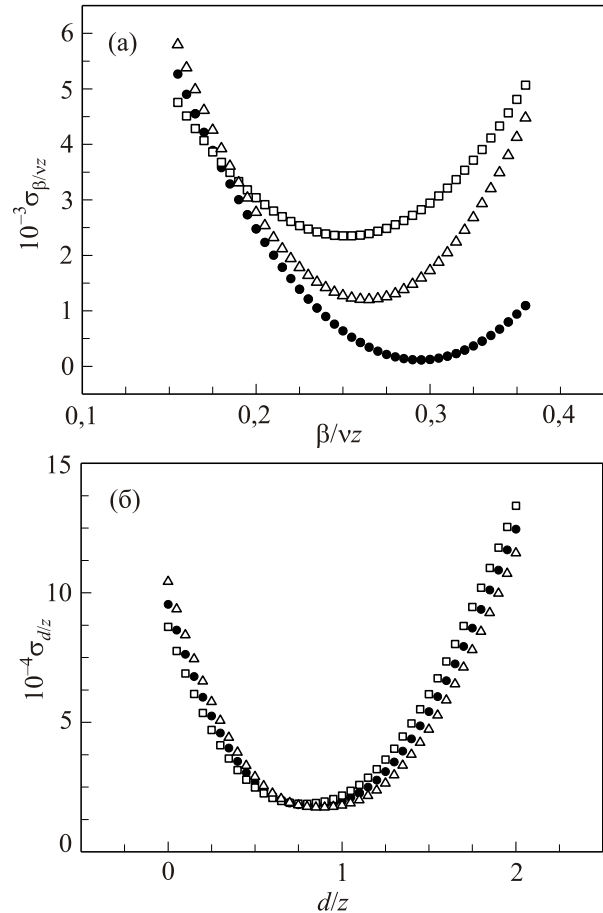


Рис. 9. Зависимость среднеквадратичной погрешности аппроксимации $\sigma_{\beta/vz}$ (а) и $\sigma_{d/z}$ (б) для различных значений индекса ω/z : 0,15 (\square), 0,25 (\bullet), 0,35 (\triangle).

де всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. В таких системах наблюдаются свойства старения [32].

Под процессом старения материалов понимают явление роста времени релаксации системы к состоянию равновесия с увеличением «возраста» материала, т.е. времени, прошедшего после приготовления образца. Явление старения проявляется математически прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. При неравновесных процессах эти функции зависят от двух переменных временной природы: t и t_w , при $t > t_w$, и не только от их разницы, но и от каждой в отдельности. Причем эта зависимость сохраняется и при достаточно больших временах наблюдения t . Временная переменная t_w характеризует возраст образца, т.е. время, прошедшее после его приготовления, и называется временем ожидания. При явлении старения процесс релаксации системы как функции времени наблюдения t замедляется тем больше, чем больше возраст образца, т.е. с увеличением времени ожидания t_w .

Таблица 1. Значения критических показателей трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами структуры

Литература	z	ν	β/ν	β	ω
Сильно неупорядоченные системы $p = 0,6$					
Настоящая работа	3,529(125)	0,821(14)	0,946(48)	–	0,882(49)
Слабо неупорядоченные системы $p = 0,8$					
Prudnikov, Medvedeva, 2012 [24]	2,257(61)	0,770(74)	0,510(78)	0,393(77)	0,786(45)
Prudnikov <i>et al.</i> , 2000 [34]	2,264	0,798	0,483	0,384	–
Однородные системы $p = 1,0$					
Chen <i>et al.</i> , 1993 [12]	–	0,7048(30)	0,5159(85)	0,3636(45)	–
Prudnikov <i>et al.</i> , 2008 [35]	2,020(7)	–	–	–	–
Prudnikov, Medvedeva, 2012 [24]	2,049(31)	0,705(26)	0,510(10)	0,360(9)	–

В настоящей работе исследована временная зависимость автокорреляционной функции:

$$A(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} S_i(t) S_i(t_w) \right\rangle \right] - [\langle m(t) \rangle][\langle m(t_w) \rangle], \quad (16)$$

где время ожидания принимает значения $t_w = 50, 250, 500, 1000$. Данные зависимости для слабо $p = 0,80$ и сильно $p = 0,60$ неупорядоченной модели Гейзенберга представлены на рис. 10. Моделирование проводилось для решеток с линейным размером $L = 64$ при значении $T = T_c$ ($p = 0,80$) = 1,197 [24] и $T = T_c$ ($p = 0,60$) = 0,888.

5. Выводы

В большинстве работ проводится исследование слабо неупорядоченных систем с концентрацией спинов $p = 0,80$ и выше [33]. Сопоставление результатов данных работ [3] указывает на то, что изингоподобные системы с концентрацией спинов от $p = 0,80$ до $p = 0,95$ принадлежат к одному и тому же классу универсальности, т.е.

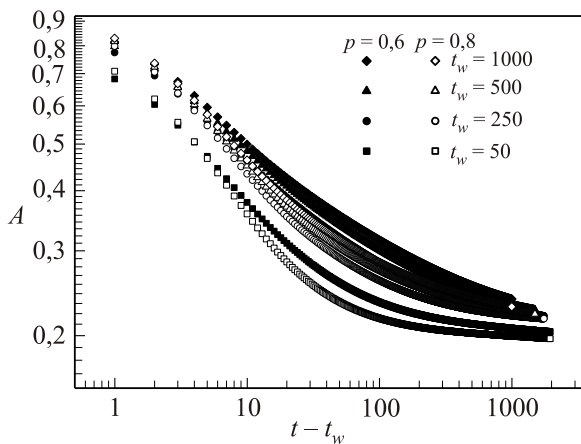


Рис. 10. Поведение автокорреляционной функции $A(t, t_w)$ для различных времен ожидания t_w для слабо ($p = 0,80$) и сильно ($p = 0,60$) неупорядоченных систем.

критические индексы, описывающие поведение данных систем в критической точке, не меняются с изменением концентрации спинов в указанном диапазоне. Менее исследованными остаются сильно неупорядоченные системы с концентрацией спинов $p < 0,69$ вплоть до порога спиновой перколяции $p_c = 0,31$. При теоретическом описании поведения таких систем уже нельзя считать концентрацию дефектов малой величиной, что сильно затрудняет или даже делает невозможным их теоретическое описание. Именно поэтому в настоящей работе для исследования выбрана система с концентрацией спинов $p = 0,60$.

В работе [12] для однородной трехмерной модели Гейзенберга было получено значение $\nu = 0,7048(30)$, в работе [24] для трехмерной слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами $\nu = 0,770(74)$. Сравнивая полученное в настоящей работе значение ν со значениями в выше указанных работах, можно сделать вывод, что однородные системы, слабо и сильно неупорядоченные принадлежат к разным классам универсальности, т.е. критические индексы, описывающие поведение данных систем в критической точке, меняются с изменением концентрации спинов. Сравнивая полученное значение для динамического индекса $z = 3,529(125)$ со значениями $z = 2,257(61)$ [24], $z = 2,264$ [34] для слабо неупорядоченных систем и со значениями $z = 2,020(7)$ [35], $z = 2,049(31)$ [24] для однородных систем, можно сделать вывод, что присутствие высокой концентрации дефектов с дальнедействующей корреляцией приводит к существенному замедлению критической релаксационной динамики.

Критические индексы для неупорядоченных систем образуют два класса универсальности: слабо и сильно неупорядоченные системы. К слабо неупорядоченным относят системы со спиновой концентрацией больше порога примесной перколяции p_{imp} . К сильно неупорядоченным относят системы с $p_c < p < p_{imp}$, где p_c — порог спиновой перколяции, когда в системе существует два взаимопроникающих протекающих кластера — спиновый и примесный. Для трехмерных систем с ко-

роткодействующим взаимодействием на кубической решетке $p_{\text{imp}} = 0,69$ и $p_c = 0,31$. Поэтому системы со спиновой концентрацией $p = 0,80$ относят к слабо неупорядоченным системам, а системы с $p = 0,60$ относят к сильно неупорядоченным. Подтверждение данного вывода о новых классах универсальности для сильно и слабо неупорядоченных систем для трехмерной модели Изинга, XY-модели и модели Поттса получены в работах [3,6,33,36,37].

Обнаруженное в результате проведенных расчетов существенное влияние дефектов структуры на характеристики критического поведения различных систем могут найти применение при отработке методики и постановке реальных физических и компьютерных экспериментов, а также практическом использовании направленной модификации свойств материалов, испытывающих фазовые превращения, за счет их легирования, что служит научной основой для создания материалов с новыми, перспективными физико-химическими свойствами.

Работа проведена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, в рамках государственного задания ВУЗам в части проведения научно-исследовательских работ на 2014–2016 гг., проект № 1627. Исследования были выполнены с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова.

1. X.P. Qin, B. Zheng, and N.J. Zhou, *J. Phys. A* **45**, 115001 (2012).
2. A. Perumal, V. Srinivas, V.V. Rao, and R.A. Dunlap, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 137202 (2003).
3. 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).
4. П.В. Прудников, В.В. Прудников, В.Ю. Колесников, М.А. Медведева, П.А. Желтышев, *Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вычислительная физика*, Р.Р. Назиров (ред.), Изд-во КДУ, Москва (2009), вып. 1, с. 264.
5. А.К. Муртазаев, *УФН* **178**, 1001 (2008).
6. А.К. Муртазаев and М.К. Ramazanov, *Phys. Rev. B* **76**, 174421 (2007).
7. V. Blavats'ka, C. von Ferber, and Yu. Holovatch, *Phys. Rev. E* **64**, 041102 (2001).
8. C. Vásquez, R. Paredes, A. Hasmay, and R. Jullien, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 170602 (2003).
9. K. Binder and J.D. Reger, *Adv. Phys.* **41**, 547 (1992).
10. A.L. Korzhenevskii, A.A. Luzhkov, and W. Schirmacher, *Phys. Rev. B* **50**, 3661 (1998).
11. M. Altarelli, M.D. Nunez-Regueiro, and M. Papoular, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3840 (1995).
12. K. Chen, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
13. R.J. Birgeneau, J. Skalyo, Jr., and G. Shirane, *J. Appl. Phys.* **41**, 1303 (1970).
14. L.P. Regnault, P. Burlet, and J. Rossat-Mignod, *Physica* **86**, 660 (1977).
15. D.G. Wiesler and H. Zabel, *Phys. Rev. B* **36**, 7303 (1987).
16. L.M. Castro, J.A. Plascak, and A.S.T. Pires, *J. Magn. Magn. Mater.* **248**, 62 (2002).
17. П.В. Прудников, В.В. Прудников, Е.А. Пospelov, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 693 (2013).
18. P. Calabrese and A. Gambassi, *J. Phys. A* **38**, R133 (2005).
19. J.Q. Yin, B. Zheng, V.V. Prudnikov, and S. Trimper, *Eur. Phys. J. B* **49**, 195 (2006).
20. H.K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989).
21. A. Weinrib and B.I. Halperin, *Phys. Rev. B* **27**, 413 (1983).
22. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1981).
23. F. Cooper, B. Freedman, and D. Preston, *Nucl. Phys. B* **210**, 210 (1989).
24. P.V. Prudnikov and M.A. Medvedeva, *Prog. Theor. Phys.* **127**, 369 (2012).
25. H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, Martín-Mayor V., and Muñoz Sudupe, *Phys. Lett. B* **378**, 207 (1996); *ibid.* **387**, 125 (1996); *Nucl. Phys. B* **483**, 707 (1997).
26. U. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
27. R.H. Swendsen and J.S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
28. J. Hoshen and R. Kopelman, *Phys. Rev. B* **14**, 3438 (1976).
29. Прудников П.В., Медведева М.А., Желтышев П.А., *Свидет.- во 2011614137, Российская Федерация. Свидет.- во о государственной регистрации программы для ЭВМ, заявитель и правообладатель ГОУ ВПО ОмГУ им. Ф.М. Достоевского (RU), №2011614137*; опублик. 26.05.11, Реестр программ для ЭВМ.
30. E.V. Albano, M.A. Bab, G. Baglietto, R.A. Borzi, T.S. Grigera, E.S. Loscar, D.E. Rodriguez, M.L. Rubio Puzzo, and G.P. Saracco, *Rep. Prog. Phys.* **74**, 026501 (2011).
31. Y. Ozeki and N. Ito, *J. Phys. A* **40**, R149 (2007).
32. P. Calabrese, A. Gambassi, and F. Krzakala, *J. Stat. Mech.* **6**, 06016 (2006).
33. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, B. Zheng, S.V. Dorofeev, and V.Y. Kolesnikov, *Prog. Theor. Phys.* **117**, 973 (2007).
34. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, and A.A. Fedorenko, *Phys. Rev. B* **62**, 8777 (2000).
35. V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, I.A. Kalashnikov, and S.S. Tsirkin, *JETP* **106**, 1095 (2008).
36. В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, *Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем*, Физматлит, Москва (2013).
37. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФНТ* **37**, 167 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 134 (2011)].

Nonequilibrium critical behavior of strongly disordered magnets with long-range correlated defects

P.V. Prudnikov and M.A. Medvedeva

The Monte-Carlo simulation of strongly disordered magnets which are described by the three-dimensional Heisenberg model with extended structural defects is reported. The values of critical temperature and critical exponents were obtained: $z = 3.529(125)$, $\nu = 0.821(14)$, $\beta = 0.777(53)$, $\omega = 0.882(49)$. It is demonstrated that the behavior of strongly disordered Heisenberg magnets with long-range correlated defects belongs to a new universality class. It is shown that a high concentration

of structural defects with long-range correlations leads to a significant critical slowing-down effects. Aging effects are discovered in the nonequilibrium behavior of strong disordered magnets.

PACS 68.35.Rh Phase transitions and critical phenomena;
75.40.Cx Static properties;
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: phase transitions and critical phenomena, disordered magnetic, critical dynamic, Monte-Carlo methods.