

# НЕРАВНОВЕСНАЯ КРИТИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ В КОРОТКОВРЕМЕННОМ РЕЖИМЕ: РЕНОРМГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*В. В. Прудников\*, П. В. Прудников, И. А. Калашников, М. В. Рычков*

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

Поступила в редакцию 3 августа 2009 г.

Исследовано влияние неравновесных начальных состояний на эволюцию анизотропных систем с замороженными некоррелированными дефектами структуры в критической точке. Впервые реализовано теоретико-полевое описание неравновесного критического поведения непосредственно трехмерных систем и проведен расчет динамического критического индекса коротковременной эволюции в двухпетлевом приближении без использования  $\varepsilon$ -разложения. Численные значения динамических критических индексов, полученные с применением методов суммирования асимптотических рядов, были сопоставлены с результатами проведенного в данной работе компьютерного моделирования неравновесного критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга в коротковременном режиме. Показано, что значения вычисленных в данной работе критических индексов находятся в лучшем соответствии с результатами компьютерного моделирования, чем результаты применения метода  $\varepsilon$ -разложения.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена исследованию одновременного влияния эффектов нарушения пространственной трансляционной симметрии системы, создаваемых присутствием дефектов структуры, и эффектов нарушения временной трансляционной симметрии, обусловленных неравновесными начальными условиями системы, на характеристики аномально медленного неравновесного критического поведения различных систем.

В последние годы исследование систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает значительный интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Это обусловлено предсказываемыми и наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения, характеризующимися нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы. Хорошо известными примерами подобных систем с медленной динамикой и эффектами старения являются такие комплексные неупорядоченные сис-

темы, как спиновые стекла [1, 2]. Однако данные особенности неравновесного поведения, как показали различные аналитические и численные исследования [3, 4], могут наблюдаться и в обычных системах, испытывающих фазовые переходы второго рода, так как их критическая динамика характеризуется аномально большими временами релаксации. Отметим, что введенное ранее для спиновых стекол флуктуационно-диссипативное отношение, связывающее двухвременную спиновую функцию отклика и двухвременную корреляционную функцию и обобщающее флуктуационно-диссипативную теорему на случай неравновесного поведения, оказывается новой универсальной характеристикой для критического поведения различных систем [5].

В последнее десятилетие существенный прогресс был достигнут в понимании и описании неравновесного критического поведения макроскопических систем, далеких от состояния равновесия. Это, прежде всего, относится к явлениям критической релаксации систем при фазовых переходах второго рода и фазовых переходах первого рода близких ко второму [6–8]. Определяющими особенностями неравновесного критического поведения подобных систем

\*E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

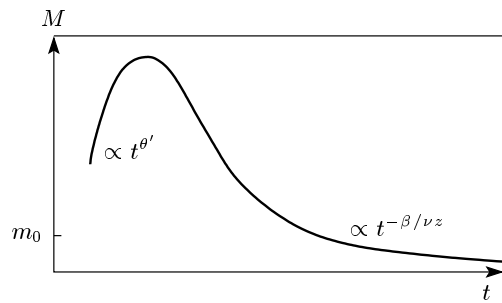


Рис. 1. Схематический график эволюции намагниченности в критической точке из начального состояния с намагниченностью  $m_0$

являются критическое замедление времени релаксации системы и аномально большие времена корреляции различных состояний системы. Данные особенности приводят к реализации динамического скейлингового поведения даже когда системы находятся в состояниях, далеких от состояния равновесия. Основываясь на скейлинговом характере временной зависимости термодинамических и корреляционных функций для неравновесных систем при температурах, близких к критической, в работах [6, 9] был дан ренормгрупповой анализ неравновесной эволюции системы в зависимости от начальных состояний системы, обоснован и предложен численный метод коротковременной динамики. В работе [6] было предсказано, что если начальное состояние ферромагнитной системы характеризуется достаточно высокой степенью хаотизации спиновых переменных со значением относительной намагниченности, далеким от состояния насыщения ( $m_0 \ll 1$ ), то в критической точке процесс релаксации системы из данного начального неравновесного состояния на макроскопически малых временах будет характеризоваться не уменьшением, а увеличением намагниченности со временем по степенному закону с показателем, характеризуемым новым независимым динамическим критическим индексом  $\theta'$ :  $M(t) \propto t^{\theta'}$ . При этом с увеличением времени коротковременная динамика роста параметра порядка сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону  $M(t) \propto t^{-\beta/\nu z}$  с показателем, определяемым отношением  $\beta/\nu z$  со статическими критическими индексами  $\beta$  и  $\nu$  и динамическим критическим индексом  $z$  (рис. 1). Наряду с этим в работе [6] предсказывалась двухвременная зависимость для функции отклика  $G(t, t_w)$  и корреляционной функции  $C(t, t_w)$ , которая в коротковременном режиме принимает вид степенной зависимости от отношения переменных  $t/t_w$  ( $t_w$  — время ожидания), характеризуемой показателем  $\theta$ :

$$G(t, t_w) \propto (t/t_w)^\theta, \quad C(t, t_w) \propto (t/t_w)^{\theta-1}. \quad (1)$$

Для показателей  $\theta$  и  $\theta'$  было получено [6] связывающее их скейлинговое соотношение

$$\theta' = \theta + (2 - z - \eta)/z,$$

поэтому независимым критическим индексом является лишь один из них. С использованием метода  $\varepsilon$ -разложения в работе [6] был проведен расчет нового динамического критического индекса  $\theta'$  (как и показателя  $\theta$ ) в двухпетлевом приближении.

В нашей работе [10] осуществлено расширение проведенного в работе [6] описания неравновесного критического поведения однородных систем на случай учета следующего по порядку теории трехпетлевого приближения при использовании в расчетах метода  $\varepsilon$ -разложения. Полученное нами [10] значение динамического критического индекса  $\theta'$  коротковременной эволюции оказалось в очень хорошем согласии с результатами численного исследования трехмерной модели Изинга в коротковременном режиме [7], значительно лучше, чем результаты двухпетлевого приближения [6].

Структурный беспорядок, обусловленный присутствием примесей или других дефектов структуры, наличие в эффективном гамильтониане нескольких типов конкурирующих взаимодействий, задающих состояние неупорядоченной системы, зачастую играют важную роль в поведении реальных материалов и физических систем. Эти факторы, действующие по отдельности или проявляющиеся одновременно в структурно-неупорядоченных системах, могут индуцировать новые типы фазовых переходов, задавать новые классы универсальности критического поведения, модифицировать кинетические свойства систем и обуславливать низкочастотные особенности в динамике системы [11]. Типичными и важными примерами подобных систем являются неупорядоченные магнитные системы с примесью немагнитных атомов, антиферромагнетики во внешнем магнитном поле, в которых структурный беспорядок индуцирует случайные магнитные поля, спиновые стекла. Статистические особенности описания неупорядоченных систем с замороженным беспорядком и эффекты критического замедления, усиливаемые дефектами структуры, создают значительные трудности как для аналитического описания, так и для численного моделирования поведения

подобных систем. Поэтому для их исследования требуется развитие новых концепций и методов описания.

При низкой концентрации дефектов структуры обычно можно пренебречь их корреляцией в пространственном распределении внутри образца. В этом приближении можно считать, что вызываемые наличием дефектов структуры эффекты типа флуктуаций локальной температуры фазового перехода  $T_c(\mathbf{x})$  или случайные поля  $h(\mathbf{x})$ , сопряженные параметру порядка, описываются гауссовыми законами распределения и являются некоррелированными ( $\delta$ -коррелированными). Существенность влияния подобного рода дефектов на критическое поведение системы определяется критерием Харриса [12], согласно которому некоррелированные дефекты модифицируют критическое поведение лишь изингоподобных систем.

В работе [13] впервые было исследовано влияние некоррелированных замороженных дефектов структуры на характеристики неравновесного критического поведения и проведен расчет функции отклика, корреляционной функции и показателей их степенной зависимости от времени в коротковременном режиме в первом порядке теории с использованием метода  $\varepsilon$ -разложения. В работе [14] было осуществлено расширение проведенного в работе [13] исследования на второй порядок теории также при использовании метода  $\varepsilon$ -разложения. Однако для структурно-неупорядоченных систем, описываемых однокомпонентным параметром порядка, из-за возникающего случайного вырождения ренормгрупповых уравнений ( $\beta$ -функций) критическое поведение наиболее интересных изингоподобных систем приходится описывать с использованием разложения по «малому» параметру  $\sqrt{\varepsilon}$ . Поэтому адекватность анализа результатов расчета характеристик критического поведения для трехмерных неупорядоченных систем при использовании  $\varepsilon$ -разложения ( $\varepsilon = 4 - d = 1$ ,  $d$  — размерность системы) оказывается еще более проблемной, чем для однородных систем, даже при применении к получающимся рядам методов суммирования асимптотических рядов. В работе [14] для динамического критического индекса  $\theta'$  коротковременной эволюции в силу взаимного сокращения слагаемых низшего порядка по  $\sqrt{\varepsilon}$  было получено выражение  $\theta' \approx 0.0868\varepsilon$ .

В работе [15] была численно исследована трехмерная модель Изинга методом коротковременной динамики при изменении концентрации точечных дефектов в широкой области и получено универсальное значение индекса  $\theta' = 0.10(2)$ , которое в пре-

делах статистических погрешностей хорошо согласуется с результатами ренормгруппового описания. Однако в работе [15] была допущена методическая некорректность, обусловленная тем, что при определении  $\theta'$  было использовано только одно начальное значение намагниченности системы с  $m_0 = 0.01$ , в то время как, согласно работе [7], наиболее правильно было бы находить  $\theta'$  в асимптотическом пределе  $m_0 \rightarrow 0$  на основании результатов измерения временной зависимости намагниченности  $M(t)$  с несколькими малыми начальными значениями намагниченности  $m_0$ . Кроме того, при анализе данных  $M(t)$  для образцов с различными концентрациями дефектов применялась [15] методика учета поправок к скейлингу с единым для всех концентраций значением динамического индекса  $z \approx 2.62$  из работы [16]. Однако данное значение индекса  $z$  не соответствует как вычисленному в нашей работе [17] значению  $z = 2.1792(13)$  при применении к описанию непосредственно трехмерных систем теоретико-полевого подхода в трехпетлевом приближении, так и значению  $z = 2.18(10)$ , экспериментально измеренному [18] в слабонеупорядоченном изинговском магнетике  $\text{Fe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{F}_2$ . Все это ставит под сомнение корректность полученного в работе [15] значения индекса  $\theta' = 0.10(2)$  и позволяет рассматривать его значение и значение  $\theta' = 0.0868$  из результатов ренормгруппового описания с использованием  $\varepsilon$ -разложения лишь как предварительные для последующих более точных исследований.

В данной работе ставится задача исследовать неравновесное критическое поведение слабонеупорядоченной трехмерной модели Изинга и определить динамические критические индексы  $\theta'$  и  $z$  как в рамках теоретико-полевого подхода с фиксированной размерностью системы  $d = 3$  в двухпетлевом приближении с последующим применением к рядам различных методов суммирования, так и численным методом коротковременной динамики для системы со спиновой концентрацией  $p = 0.80$ .

## 2. РЕНОРМГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СТРУКТУРНО-НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Для описания критического поведения структурно-неупорядоченных изинговских систем в состоянии равновесия используется модельный гамильтониан Гинзбурга–Ландау–Вильсона

$$H_{GL}[s] = \int d^d x \times \left\{ \frac{1}{2!} [(\nabla s(\mathbf{x}))^2 + \tau(\mathbf{x})s^2(\mathbf{x})] + \frac{g}{4!} s^4(\mathbf{x}) \right\}, \quad (2)$$

где  $s(\mathbf{x})$  — поле параметра порядка,  $\tau(\mathbf{x})$  — приведенная случайная локальная температура фазового перехода второго рода,  $g$  — амплитуда взаимодействия флуктуаций параметра порядка. Случайную температуру можно представить в виде  $\tau(\mathbf{x}) = \tau + V(\mathbf{x})$ , где  $\tau$  — приведенная температура фазового перехода для однородной системы, а  $V(\mathbf{x})$  — потенциал случайного поля дефектов. Пространственное распределение системы замороженных точечных некоррелированных дефектов характеризуется гауссовым распределением  $P[V]$  и полностью определяется значениями первого и второго моментов для случайных величин  $V(\mathbf{x})$ :

$$\langle\langle V(\mathbf{x}) \rangle\rangle = 0, \quad \langle\langle V(\mathbf{x})V(\mathbf{y}) \rangle\rangle = v\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (3)$$

где  $v$  — положительная константа, пропорциональная концентрации дефектов и квадрату величины их потенциала.

Пусть реализация в системе любой конфигурации параметра порядка в момент времени  $t$  определяется условием, что в начальный момент  $t = 0$  для системы с начальной намагниченностью  $m_0$  распределение для поля параметра порядка  $s(\mathbf{x}, 0) = s_0(\mathbf{x})$  характеризуется функцией распределения  $P[s_0] \propto \exp(-H_0[s_0])$ , где

$$H_0[s_0] = \int d^d x \frac{\tau_0}{2} [s_0(\mathbf{x}) - m_0(\mathbf{x})]^2, \quad (4)$$

а  $\tau_0^{-1}$  — ширина начального распределения намагниченности. Данное гауссово распределение для поля параметра порядка может быть реализовано для температур  $T \gg T_c$ , при которых еще не возникает дальнедействующих корреляций для флуктуаций параметра порядка.

Будем рассматривать наиболее интересный случай чисто релаксационной критической динамики параметра порядка (модель А в классификации Гальперина–Хоэнберга [19]), для которого динамический критический индекс  $\theta'$  коротковременной эволюции является принципиально новым и не может быть выражен через известные статические критические индексы и индексы равновесной динамики. Релаксационная динамика параметра порядка задается уравнением Ланжевена

$$\frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\lambda \frac{\delta H_{GL}[s]}{\delta s(\mathbf{x}, t)} + \zeta(\mathbf{x}, t), \quad (5)$$

где  $H_{GL}[s]$  — гамильтониан Гинзбурга–Ландау–Вильсона (2),  $\lambda$  — кинетический коэффициент,  $\zeta(\mathbf{x}, t)$  — гауссова случайная сила, моделирующая короткоживущие возбуждения и задаваемая функционалом вероятности

$$P[\zeta] \propto \exp \left[ -\frac{1}{4\lambda} \int d^d x \int dt (\zeta(\mathbf{x}, t))^2 \right], \quad (6)$$

$$\langle\zeta_\alpha(\mathbf{x}, t)\rangle = 0,$$

$$\langle\zeta_\alpha(\mathbf{x}, t)\zeta_\beta(\mathbf{x}', t')\rangle = 2\lambda \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t').$$

В рамках теоретико-полевого описания динамики критических явлений [20, 21] вводится вспомогательное поле  $\tilde{s}(\mathbf{x})$ , позволяющее провести усреднение по случайным силам  $\zeta(x, t)$  и осуществить эквивалентное ланжевенской динамике описание критической динамики с помощью производящего функционала  $W[h, \tilde{h}]$  для динамических корреляционных функций  $C(x_1, t_1, x_2, t_2)$  и функций отклика  $G(x_1, t_1, x_2, t_2)$  в виде

$$C(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2) = \left. \frac{\delta^2 W[h, \tilde{h}]}{\delta h(\mathbf{x}_1, t_1) \delta \tilde{h}(\mathbf{x}_2, t_2)} \right|_{h, \tilde{h}=0},$$

$$G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2) = \left. \frac{\delta^2 W[h, \tilde{h}]}{\delta h(\mathbf{x}_1, t_1) \delta \tilde{h}(\mathbf{x}_2, t_2)} \right|_{h, \tilde{h}=0}, \quad (7)$$

$$W[h, \tilde{h}] = \ln \left\{ \int \mathcal{D}(s, i\tilde{s}) P[V] \times \right.$$

$$\times \exp(-\mathcal{L}_V[s, \tilde{s}, V] - H_0[s_0]) \times$$

$$\left. \times \exp \left( \int d^d x \int_0^\infty dt (\tilde{h}\tilde{s} + hs) \right) \right\},$$

в котором функционал действия  $\mathcal{L}_V[s, \tilde{s}, V]$  системы характеризуется выражением

$$\mathcal{L}_V[s, \tilde{s}, V] = \int_0^\infty dt \int d^d x \tilde{s} \left[ \frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \lambda \frac{\delta H_{GL}[s]}{\delta s(\mathbf{x}, t)} - \lambda \tilde{s} \right]. \quad (8)$$

Выражение (7) для производящего функционала  $W[h, \tilde{h}]$  можно усреднить по случайным полям  $V(x)$ , задаваемым дефектами структуры,

$$\int dV P[V] \exp(-\mathcal{L}_V[s, \tilde{s}, V]) = \exp(-\mathcal{L}[s, \tilde{s}]), \quad (9)$$

и получить функционал действия  $\mathcal{L}[s, \tilde{s}]$ , не зависящий от случайных полей  $V(x)$  и являющийся трансляционно инвариантным, в следующем виде [14]:

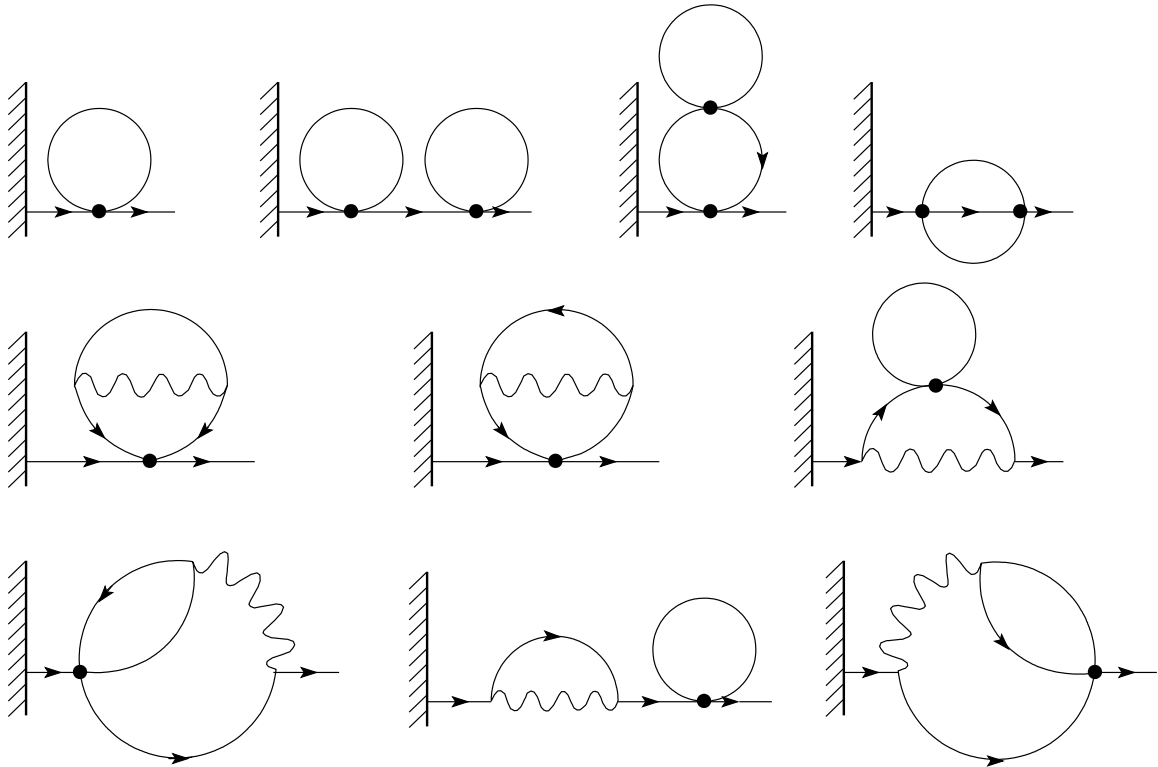


Рис. 2. Диаграммы, определяющие вклад в вершинные функции  $\Gamma_{1,0}^{(i)}$ . Линиям соответствуют затравочные корреляторы  $C_0^{(i)}$ , линиям со стрелкой — затравочные функции отклика  $G_0$ , вершине взаимодействия  $g$  — жирная точка, вершине  $v$  — волнистая линия. «Поверхность»  $t = 0$  обозначена вертикальной чертой

$$\mathcal{L}[s, \tilde{s}] = \int_0^\infty dt \int d^d x \tilde{s} \left[ \frac{\partial s}{\partial t} + \lambda(\tau - \nabla^2)s + \frac{\lambda g}{6}s^3 - \lambda \tilde{s} \right] - v \frac{\lambda^2}{2} \left[ \int_0^\infty dt \int d^d x \tilde{s} s \right]^2. \quad (10)$$

Рассмотрение гауссовой составляющей функционала (10) при  $g = 0, v = 0$  позволяет при граничном условии Дирихле ( $\tau_0 = \infty$ ) получить выражения для затравочной функции отклика  $G_0(q, t - t')$  и затравочной корреляционной функции  $C_0^{(D)}(q, t, t')$  [6]:

$$G_0(q, t - t') = \exp[-\lambda(q^2 + \tau)|t - t'|], \quad (11)$$

$$C_0^{(D)}(q, t, t') = C_0^{(e)}(q, t - t') + C_0^{(i)}(q, t + t'), \quad (12)$$

где

$$C_0^{(e)}(q, t - t') = \frac{1}{q^2 + \tau} \exp[-\lambda(q^2 + \tau)|t - t'|], \quad (13)$$

$$C_0^{(i)}(q, t + t') = -\frac{1}{q^2 + \tau} \exp[-\lambda(q^2 + \tau)(t + t')]. \quad (14)$$

При ренормгрупповом анализе модели для устранения возникающих в пределе  $\tau \rightarrow 0$  при учете взаимодействия критических флуктуаций параметра порядка расходимостей в динамических корреляционных функциях и функциях отклика нами были применены процедура размерной регуляризации и схема минимальных вычитаний [22] с последующим перепределением параметров гамильтониана и мультипликативной перенормировкой полей функционала (10):

$$\begin{aligned} s &\rightarrow Z_s^{1/2} s, & \tilde{s} &\rightarrow Z_{\tilde{s}}^{1/2} \tilde{s}, & \tilde{s}_0 &\rightarrow (Z_{\tilde{s}} Z_0)^{1/2} \tilde{s}_0, \\ \lambda &\rightarrow (Z_s / Z_{\tilde{s}})^{1/2} \lambda, & \tau &\rightarrow Z_s^{-1} Z_\tau \mu^2 \tau, \\ g &\rightarrow Z_g Z_s^{-2} \mu^{4-d} g, & v &\rightarrow Z_v Z_s^{-2} \mu^{4-d} v, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\mu$  — размерный параметр. Вычисление всех констант  $Z_i$  перенормировки при фиксированной размерности системы  $d = 3$ , кроме  $Z_0$ , можно найти в работе [23]. В настоящей работе представлен расчет  $Z_0$  для структурно-неупорядоченных систем в двухпетлевом приближении теории при  $d = 3$ .

За счет введения в теорию начальных условий вида (4) возникает необходимость в перенормиров-

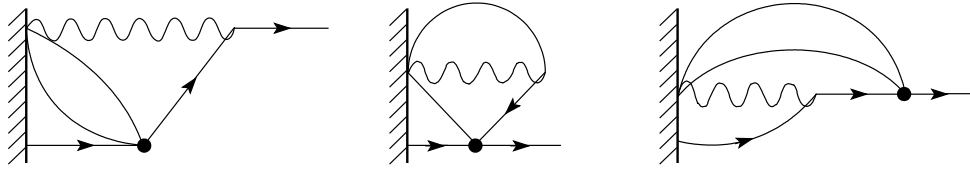


Рис. 3. Диаграммы, определяющие вклад в вершинную функцию  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$ . Линиям соответствует равновесный коррелятор  $C_0^{(e)}$  (13)

ке функции отклика  $\langle s(q, t)\tilde{s}_0(-q, 0) \rangle$ , задающей влияние начальных состояний системы. Поправочные слагаемые в собственно-энергетической части функции отклика, возникающие за счет эффектов взаимодействия флуктуаций параметра порядка, характеризуются приводимыми динамическими диаграммами Фейнмана, поскольку их вычисление осуществляется с использованием коррелятора (12), не обладающего свойством трансляционной инвариантности во времени. В работе [6] было введено следующее представление для данной функции отклика:

$$G_{1,1}^{(i)}(q, t) = \langle s(q, t)\tilde{s}_0(-q, 0) \rangle = \int_0^t dt' \bar{G}_{1,1}(q, t, t') \Gamma_{1,0}^{(i)}(q, t')_{[\bar{s}_0]}. \quad (16)$$

Одночастичная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}^{(i)}(q, t)_{[\bar{s}_0]}$  с одной вставкой поля  $\tilde{s}_0$  в двухпетлевом приближении описывается диаграммами, представленными на рис. 2 и характеризуемыми требованием, чтобы они содержали хотя бы один коррелятор  $C_0^{(i)}$ . Множитель  $\bar{G}_{1,1}(q, t, t')$  определяется равновесной составляющей  $C_0^{(e)}$  коррелятора (12). Отметим, что он отличен от равновесной функции отклика  $G_{1,1}^{(eq)}(q, t - t')$  по причине интегрирования в (16) по времени от начального момента  $t = 0$  вместо  $t = -\infty$ . Однако между ними можно установить функциональную связь уже в двухпетлевом приближении для структурно-неупорядоченных систем [14], если воспользоваться вместо функционала (4) функционалом  $H_{GL}[s_0]$  (2) с новыми вершинами взаимодействия в функционале действия (10),

$$\frac{\lambda g}{6} \int dt \int d^d x (\tilde{s}_0 s_0^3) - v \frac{\lambda^2}{2} \left[ \int_0^\infty dt \int d^d x (\tilde{s}_0 s_0) \right]^2. \quad (17)$$

За счет усреднения по начальным полям возникает дополнительная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$ , локали-

зованная на «поверхности»  $t = 0$ . От первого слагаемого в (17), как показано нами ранее [10], флуктуационные поправки к  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$  возникают только начиная с трехпетлевого приближения, в то время как за счет второго слагаемого в (17), обусловленного влиянием структурных дефектов, флуктуационные поправки к  $\Gamma_{1,0}^{(eq)}$  возникают уже начиная с двухпетлевого приближения (рис. 3). Имеет место следующее выражение, аналогичное (16):

$$G_{1,1}^{(eq)}(q, t - t') = \int_{t'}^t dt'' \bar{G}_{1,1}(q, t, t'') \Gamma_{1,0}^{(eq)}(q, t'')_{[\bar{s}(t'')]}. \quad (18)$$

Решив интегральное уравнение

$$\delta(t - t') = \int_{t'}^t dt'' K(q, t'', t') \Gamma_{1,0}^{(eq)}(q, t'')_{[\bar{s}(t'')]}, \quad (19)$$

в каждом порядке теории найдем его ядро  $K(q, t'', t')$ , флуктуационные поправки к которому для структурно-неупорядоченных систем возникают начиная со второго порядка, а для однородных систем — только с третьего порядка теории. В результате одночастичная вершинная функция  $\Gamma_{1,0}(q, t)$ , определяющая функцию отклика на неравновесные начальные состояния системы, определяется выражением

$$\Gamma_{1,0}(q, t) = \int_0^t dt' K(q, t, t') \Gamma_{1,0}^{(i)}(q, t')_{[\bar{s}_0]} \quad (20)$$

и задается в двухпетлевом приближении диаграммами, изображенными на рис. 2 и 3.

Используя выражения (16) и (18)–(20) и перенормируя поля в соответствии с (15), определим следующее нормировочное соотношение для определения перенормировочной константы  $Z_0$ :

$$Z_0^{-1/2} \Gamma_{1,0}^R(q = 0, i\omega/2\lambda = \mu^2) = 1, \quad (21)$$

где  $\Gamma_{1,0}^R(q, \omega)$  — фурье-образ перенормированной одночастичной вершинной функции  $\Gamma_{1,0}(q, t)$ , рассчитываемой в удобной для нормировки точке с  $\tau = 0$ , импульсом  $q = 0$  и частотой  $i\omega/2\lambda = \mu^2$ .

Последовательная реализация изложенной процедуры и расчет диаграмм при  $d = 3$  позволили вычислить константу перенормировки  $Z_0$  в двухпетлевом приближении:

$$Z_0 = 1 + \frac{2}{3}g_R + 0.012682g_R^2 - 0.608932g_Rv_R, \quad (22)$$

где  $g_R$  и  $v_R$  — перенормированные константы связи.

Инвариантность по отношению к ренормгрупповым преобразованиям обобщенной связной функции Грина  $G_{N,\bar{N}}^{\bar{M}} \equiv \langle [s]^N [\bar{s}]^{\bar{N}} [\check{s}_0]^{\bar{M}} \rangle$  можно выразить дифференциальным ренормгрупповым уравнением Каллана–Симанчика [6, 22]

$$\left\{ \mu\partial_\mu + \zeta\lambda\partial_\lambda + \kappa\tau\partial_\tau + \beta_g\partial_g + \beta_v\partial_v + \frac{N}{2}\gamma + \frac{\bar{N}}{2}\tilde{\gamma} + \frac{\bar{M}}{2}(\tilde{\gamma} + \gamma_0) + \zeta\tau_0^{-1}\partial_{\tau_0^{-1}} \right\} G_{N,\bar{N}}^{\bar{M}} = 0. \quad (23)$$

Ренормгрупповые функции — коэффициенты в (23) — характеризуются выражениями

$$\begin{aligned} \gamma &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 \ln Z_s, & \tilde{\gamma} &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 \ln Z_{\bar{s}}, \\ \zeta &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 \ln \lambda = \frac{1}{2}(\tilde{\gamma} - \gamma), & \kappa &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 \ln \tau, \\ \beta_g &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 g, & \beta_v &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 v, & \gamma_0 &\equiv (\mu\partial_\mu)_0 \ln Z_0, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $(\partial_\mu)_0 \equiv (\partial/\partial\mu)_0$  обозначает дифференцирование с постоянными затравочными параметрами  $g, v, \lambda$  и  $\tau$ . Для коротковременного режима неравновесной критической релаксации принципиально новой является лишь ренормгрупповая функция  $\gamma_0$ , которая в двухпетлевом приближении, как показали наши расчеты, описывается следующим выражением:

$$\gamma_0 = -\frac{2}{3}g_R + 0.457127g_R^2 - 0.614995g_Rv_R. \quad (25)$$

Неподвижная точка  $(g^*, v^*)$  ренормгрупповых преобразований определяется из уравнений

$$\beta_g(g^*, v^*) = 0, \quad \beta_v(g^*, v^*) = 0. \quad (26)$$

Общее решение дифференциального уравнения (23) методом характеристик в неподвижной точке характеризуется следующей скейлинговой формой [6]:

$$\begin{aligned} G_{N,\bar{N}}^{\bar{M}}(\{x, t\}, \tau, \tau_0^{-1}, \lambda, g^*, v^*, \mu) &= \\ &= l^{(d-2+\eta_s)N/2+(d+2+\eta_{\bar{s}})\bar{N}/2+(d+2+\eta_s+\eta_0)\bar{M}/2} \times \\ &\times G_{N,\bar{N}}^{\bar{M}}(\{lx, l^{2+\zeta^*}t\}, \tau l^{-2+\kappa^*}, \tau_0^{-1}l^{2+\zeta^*}, \\ &\lambda, g^*, v^*, \mu), \quad (27) \end{aligned}$$

где  $l$  — масштабный фактор,  $\eta_s = \gamma^*$ ,  $\eta_{\bar{s}} = \tilde{\gamma}^*$  и  $\eta_0 = \gamma_0^*$  — показатели аномальных размерностей. Можно связать функции в (27) с критическими индексами, фигурирующими в скейлинговых соотношениях, например,

$$\begin{aligned} z &= 2 + \zeta^*, & 1/\nu &= 2 - \kappa^*, \\ \theta &= -\frac{\gamma_0^*}{2(2 + \zeta^*)}, & \theta' &= -\frac{\zeta^* + \gamma^* + \gamma_0^*/2}{2 + \zeta^*}, \end{aligned} \quad (28)$$

и задающими динамический критический индекс  $z$ , критический индекс  $\nu$  корреляционной длины,  $\theta$  и  $\theta'$  — динамические критические индексы неравновесной эволюции для функции отклика и намагниченности. В результате в данной работе для неупорядоченной модели Изинга были получены следующие выражения для динамических критических индексов:

$$\begin{aligned} z &= 2 - 0.25v^* + 0.00840(g^*)^2 + \\ &+ 0.030862g^*v^* + 0.053240(v^*)^2, \\ \theta &= \frac{1}{6}g^* - 0.1142817(g^*)^2 + 0.174582g^*v^*, \\ \theta' &= \frac{1}{6}g^* + 0.125v^* - 0.123968(g^*)^2 + \\ &+ 0.14680608g^*v^* - 0.0156245(v^*)^2. \end{aligned} \quad (29)$$

Для дальнейших вычислений нами были использованы значения констант связи в неподвижной точке  $g^* = 2.2514(42)$ ,  $v^* = 0.7049(13)$ . Данные значения были определены в работе [17] при применении различных методов суммирования к функциям  $\beta_g$  и  $\beta_v$  в (26), вычисленным в работе [24] при  $d = 3$  в шестипетлевом приближении. Необходимо отметить, что возникающие в теории критических явлений ряды по константам связи как для функций  $\beta_g$  и  $\beta_v$ , так и для критических индексов (29) являются факториально расходящимися, но могут рассматриваться как асимптотические. Для получения физически разумных значений критических индексов для трехмерных систем применяются специально разработанные методы суммирования асимптотических рядов [17, 25–29], из которых наиболее эффективными являются методы Паде–Бореля, Паде–Бореля–Лероя и конформного отображения. К полученным рядам для независимых динамических критических индексов  $z$  и  $\theta'$  (29) были применены данные методы суммирования. В результате были вычислены следующие значения  $z$  и  $\theta'$  при применении метода Паде–Бореля:

$$z = 2.2009867, \quad \theta' = 0.091898,$$

метода Паде–Бореля–Лероя (при значении параметра  $b = 2.221426$  [17]):

$$z = 2.198340, \quad \theta' = 0.120284,$$

метода конформного отображения Паде–Бореля:

$$z = 2.205156, \quad \theta' = 0.104441.$$

Итоговые средние значения критических индексов:

$$z = 2.2015(20), \quad \theta' = 0.1055(82).$$

Отметим, что данные значения динамического критического индекса  $z$ , вычисленные в двухпетлевом приближении, превышают его значения (со средним  $z = 2.1792(13)$ ), рассчитанные нами ранее [17, 23] в трехпетлевом приближении теории с применением различных методов суммирования. Это служит отражением наблюдаемых отклонений значений критических индексов от их асимптотических значений переменных по знаку и уменьшающихся с ростом порядка теории [26]. Полученные значения критического индекса  $z$  находятся в прекрасном согласии со значением  $z = 2.18(10)$ , выявленным экспериментально [18] методом мессбауэровской спектроскопии в результате прецизионного измерения динамического уширения мессбауэровских линий в слабаразбавленном образце изинговского магнетика  $\text{Fe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{F}_2$ .

Проведем теперь сопоставление рассчитанных значений критического индекса  $z$  с результатами компьютерного моделирования критической динамики неупорядоченной трехмерной модели Изинга:  $z = 2.19(7)$  для систем со спиновой концентрацией  $p = 0.95$ ,  $z = 2.20(8)$  при  $p = 0.8$ ,  $z = 2.58(9)$  при  $p = 0.6$  и  $z = 2.65(12)$  при  $p = 0.4$  [30];  $z = 2.16(1)$  при  $p = 0.95$ ,  $z = 2.232(4)$  при  $p = 0.9$ ,  $z = 2.38(1)$  при  $p = 0.8$  и  $z = 2.93(3)$  при  $p = 0.6$  [31]. Данные результаты моделирования критической динамики находятся в достаточно хорошем согласии с результатами теоретико-полевого расчета лишь для слабонеупорядоченных систем с  $p \geq 0.8$ , в то время как для сильнонеупорядоченных систем наблюдается значительное расхождение результатов. При этом следует отметить, что результаты ренормгруппового описания критического поведения неупорядоченных систем справедливы лишь в области слабой неупорядоченности.

Для объяснения наблюдаемой при компьютерном моделировании зависимости индекса  $z$  от величины структурного беспорядка в работе [30] была предложена гипотеза ступенчатой универсальности, согласно которой в системах при спиновых кон-

центрациях выше порога спиновой перколяции может наблюдаться несколько типов различного критического поведения в зависимости от того, существует ли в системе лишь один спиновый протекающий кластер, как в случае слабонеупорядоченных систем, или наряду со спиновым протекающим кластером реализуется и примесный протекающий кластер, как в случае сильнонеупорядоченных систем, с существованием переходных режимов между областями. В работе [31] автор, исходя из концепции универсальности критического поведения неупорядоченных систем и независимости асимптотического значения индекса  $z$  при  $L \rightarrow \infty$  от степени беспорядка, на основе приведенных выше эффективных значений индекса получил его асимптотическое значение  $z = 2.4(1)$ . Однако данное значение индекса находится в сильном несоответствии как с полученными нами результатами, так и с экспериментально измеренным значением  $z = 2.18(10)$ .

В работе [16] был проведен анализ численного исследования критической динамики трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией, изменяющейся в широком интервале. Авторы, предполагая универсальность критического поведения неупорядоченных систем, выделили асимптотическое значение индекса  $z = 2.62(7)$  с учетом эффектов влияния ведущих поправок к скейлинговой зависимости для динамической восприимчивости системы. При этом полученное в работе [16] значение индекса поправки к скейлингу,  $\omega = 0.50(13)$ , сильно не соответствует результатам теоретико-полевого расчета статических критических индексов, осуществленного с применением методов суммирования [24] и давшего значение  $\omega = 0.25(10)$ , а также результатам численного исследования статического критического поведения той же модели [32], проведенного также с учетом эффектов влияния ведущих поправок к скейлинговой зависимости термодинамических величин и корреляционных функций с  $\omega = 0.37(6)$ . При использованных в работе [16] аппроксимациях наибольшими погрешностями характеризовались результаты для слабонеупорядоченных систем. Полученное значение динамического критического индекса  $z = 2.62(7)$  [16] еще больше не соответствует результатам наших вычислений и экспериментальным исследованиям из работы [18].

Сопоставление рассчитанных в данной работе значений критического индекса  $\theta'$  со значением  $\theta' = 0.0867$ , полученным при применении метода  $\varepsilon$ -разложения [14] в том же двухпетлевом приближении теории, показывает, что все они превышают это значение и максимальным отклонени-



ем характеризуется значение  $\theta' = 0.120284$ , полученное при применении метода суммирования Паде – Бореля – Лероя. Данный метод является обобщением метода Паде – Бореля с интегральным преобразованием

$$f(g) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n g^n = \int_0^{\infty} dt e^{-t} B(gt^b),$$

$$B(g) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n g^n, \quad B_n = \frac{c_n}{\Gamma(bn + 1)},$$
(30)

где значение параметра  $b = 2.221426$  было подобрано [17] на основе анализа сходимости тестового ряда для точно решаемой задачи об энергии ангармонического осциллятора с асимптотической сходимостью ряда, аналогичной рядам теории критических явлений.

Все рассчитанные значения критического индекса  $\theta'$  как в данной работе, так и в работе [14] попадают в интервал погрешностей показателя  $\theta' = 0.10(2)$ , измеренного [15] при численных исследованиях методом коротковременной динамики трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией  $p = 0.80$ . Однако методические недостатки проведенного в работе [15] исследования, отмеченные нами во Введении, не дают оснований удовлетвориться данным результатом. Ниже приводятся методика и результаты осуществленного нами исследования по компьютерному моделированию неравновесного критического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга с той же спиновой концентрацией  $p = 0.80$ , что и в работе [15]. В проведенном нами комплексном исследовании определены не только критический индекс  $\theta'$ , но и индекс  $z$  и отношение статических индексов  $\beta/\nu$ .

### 3. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Проведем численное исследование влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности  $M(t)$  ферромагнитной структурно-неупорядоченной системы в критической точке. Известно, что аномальные особенности явлений 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, созданного, например, при температурах, много больших критической, и характеризуемого поэтому малой корреляционной длиной, в сильнокоррелированное состояние при критической температуре. В работе [6] на основе ренормгруппового анализа неравновесного критического поведения спиновой системы с начальным значением намагниченности  $m_0$  было показано, что после микроскопически малого промежутка времени  $t_{mic}$  для  $k$ -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0),$$
(31)

где  $t$  — время,  $\tau = (T - T_c)/T_c$  — приведенная температура,  $b$  — произвольный масштабный фактор,  $L$  — линейный размер решетки,  $\beta, \nu, z$  — известные критические индексы,  $x_0$  — новый независимый критический индекс, задающий масштабную размерность начального значения намагниченности  $m_0$ . На ранней стадии эволюции системы корреляционная длина еще достаточно мала и конечность размера моделируемой системы оказывается несущественной. Полагая  $b = t^{1/z}$  в выражении (31), для первого момента намагниченности ( $k = 1$ ) и малой величины  $m_0 t^{1/z}$  получаем следующее выражение:

$$M(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^{\theta'} F(t^{1/\nu z} \tau, t^{x_0/z} m_0) = m_0 t^{\theta'} (1 + at^{1/\nu z} \tau) + O(\tau^2, m_0^2),$$
(32)

где  $\theta' = (x_0 - \beta/\nu)/z$ . Для  $\tau \rightarrow 0$  и достаточно малых  $t$  получаем асимптотическое поведение  $M(t) \propto t^{\theta'}$ . Временной интервал увеличения намагниченности,  $t_{cr} \propto m_0^{-z/x_0}$ , заметно растет с уменьшением  $m_0$ . С течением времени коротковременная динамика увеличения параметра порядка сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону  $M(t) \propto t^{-\beta/z\nu}$  с показателем, определяемым отношением  $\beta/z\nu$  со статическими критическими индексами  $\beta$  и  $\nu$  и динамическим критическим индексом  $z$  (см. рис. 1).

Для численного определения показателя  $\theta'$  расматривается модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с линейным размером  $L = 128$  и наложенными граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Изинга задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j,$$
(33)

где  $J > 0$  — интеграл обменного взаимодействия между закрепленными в узлах решетки спинами  $S_i$ , принимающими значения  $\pm 1$ , а суммирование ведется по всем ближайшим парам спинов. Немагнитные атомы примеси образуют пустые узлы. Числа заполнения  $p_i$  при этом принимают значения 0 или 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(1 - p_i) \quad (34)$$

с  $p = 1 - c$ , где  $c$  — концентрация атомов примеси.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применен алгоритм Метрополиса. Алгоритм Метрополиса, реализующий динамику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели А в классификации Гальперина–Хоэнберга [19] и позволяет провести сравнение получаемого в результате моделирования неравновесного критического поведения системы динамических критических индексов  $z$  и  $\theta'$  с результатами проведенного выше ренормгруппового описания.

При реализации алгоритма Метрополиса для неупорядоченной модели Изинга численно определяется временная зависимость  $k$ -го момента намагниченности в виде

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

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям, а квадратные скобки — усреднение по различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации  $p = 0.80$ ,  $N_s = pL^3$  — число спинов в решетке. В данной работе проводилось усреднение вычисляемых величин по 4000 различным примесным конфигурациям с 25 прогонами для каждой примесной конфигурации. Для независимого вычисления динамических критических индексов  $\theta'$  и  $z$ , а также отношения статических критических индексов  $\beta/\nu$  на каждом этапе эволюции системы наряду с намагниченностью системы определялись автокорреляционная функция

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

и второй момент намагниченности  $M^{(2)}(t)$ . Их скейлинговый анализ показывает [7], что при  $m_0 = 0$  и критической температуре  $T = T_c$  данные величины

характеризуются степенной зависимостью от времени:

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

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

Моделирование осуществлялось при критической температуре  $T_c = 3.49948(18)$ , определенной нами при численных исследованиях методом Монте-Карло неупорядоченной трехмерной модели Изинга в равновесном состоянии [33]. Временное поведение намагниченности с начальными значениями  $m_0 = 0.01, 0.02, 0.03$  исследовалось на временах до 1000 шагов Монте-Карло на спин (ШМК/спин). Поскольку начальная спиновая конфигурация с намагниченностью  $m_0$  должна быть неравновесной, нами был применен следующий способ ее получения: с помощью алгоритма Вольфа при температуре  $T = 8 \gg T_c = 3.49948$  система из начального состояния «все спины вверх» с  $m = 1$  приводилась к состоянию с намагниченностью  $m$ , близкой к желаемой  $m_0$ , а затем переворотом отдельных спинов достигалось состояние с  $m_0$ . Полученная конфигурация сохранялась, а затем исследовалась ее временная эволюция при  $T_c = 3.49948$  с помощью алгоритма Метрополиса. На рис. 4 представлены усредненные по 4000 различным примесным конфигурациям с 25 прогонами для каждой примесной конфигурации временные зависимости для намагниченностей системы. Они позволяют определять показатели  $\theta'(m_0)$  и их асимптотическое значение  $\theta'(m_0 \rightarrow 0)$  на основе линейной аппроксимации значений  $\theta'(m_0)$  при  $m_0 \rightarrow 0$ . На рис. 5 для данной системы, стартующей из неравновесного начального состояния с близким к нулю значением  $m_0 = 0.0001$ , представлены временные зависимости для второго момента намагниченности  $M^{(2)}$  и автокорреляционной функции  $A$ . Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей  $c_a$  и  $c_2$  в соответствии с выражением (37).

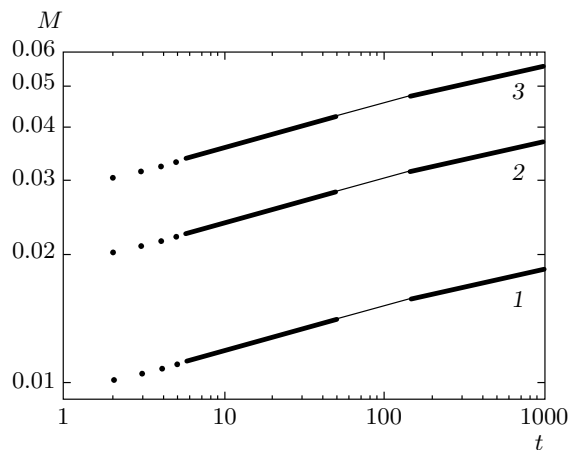
Из рис. 4, 5 видно, что на каждом графике могут быть выделены по два линейных участка: для временных интервалов в среднем от 7 до 50 ШМК/спин и от 150 до 1000 ШМК/спин. Мы связываем это с наблюдаемым уже при моделировании структурно-неупорядоченных систем с линейными дефектами [34] явлением кроссовера, т. е. перехода от критического поведения, характерного для однородных систем, к поведению, характеризующемуся влиянием дефектов структуры. Нами были определены показатели для каждого линейного участка исследуемых

**Таблица 1.** Критические показатели, характеризующие эволюцию неупорядоченной модели Изинга с  $p = 0.80$  на разных временных интервалах

$m_0$	$\theta$	$c_2$	$c_a$	$\theta$	$c_2$	$c_a$
	$t \in [7, 50]$			$t \in [150, 1000]$		
0.03	0.1016(9)	—	—	0.083(3)	—	—
0.02	0.1031(10)	—	—	0.099(5)	—	—
0.01	0.1043(12)	—	—	0.105(9)	—	—
0	0.1057(17)	0.936(4)	1.347(8)	0.122(11)	0.859(5)	1.135(10)

**Таблица 2.** Критические показатели временной эволюции неупорядоченной модели Изинга с  $p = 0.80$ , вычисленные с учетом поправок к скейлингу

$m_0$	$\theta$	$c_2$	$c_a$	$(\omega/z)_{av}$	$\omega_{av}$
0.03	0.104(12), $\omega/z = 0.074$	—	—	—	—
0.02	0.117(10), $\omega/z = 0.068$	—	—	—	—
0.01	0.118(10), $\omega/z = 0.096$	—	—	—	—
0	0.127(16), $\omega/z = 0.079(9)$	0.909(4), $\omega/z = 0.112$	1.242(10), $\omega/z = 0.160$	0.117(24)	0.256(56)



**Рис. 4.** Временные зависимости критического поведения намагниченности  $M$  для систем со спиновой концентрацией  $p = 0.80$  при начальных значениях  $m_0 = 0.01$  (1), 0.02 (2), 0.03 (3); здесь и на рис. 5 единица измерения времени — шаг Монте-Карло на спин

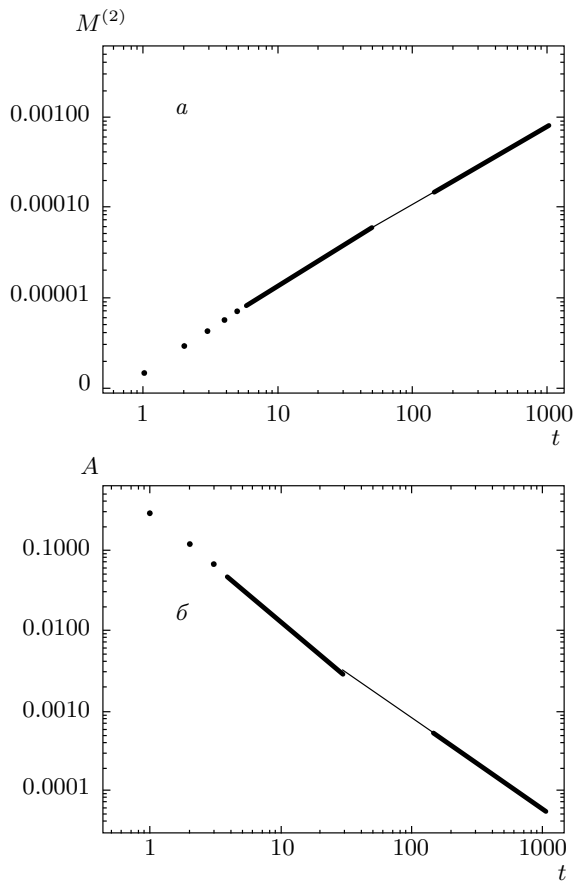
величин. Полученные значения показателей приведены в табл. 1.

В данной работе были также учтены поправки к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем и неточности в определении их критической темпера-

туры, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов [15, 17, 32, 34, 35]. Для этого были применены следующие выражения для временной зависимости наблюдаемых величин  $X$ :

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

где  $A_X$  — неуниверсальные амплитуды,  $\omega$  является хорошо известным критическим индексом поправки к скейлингу, а показатель  $\delta = \theta'$  в случае  $X \equiv M(t)$ ,  $\delta = -c_a$  в случае  $X \equiv A(t)$  и  $\delta = c_2$  в случае  $X \equiv M^{(2)}(t)$ . Теоретико-полевая оценка для  $\omega$  в шестипетлевом приближении дает значение  $\omega \approx 0.25(10)$  [24]. Для расчета значений критических индексов  $\theta'$ ,  $c_a$ ,  $c_2$  и  $\omega/z$  на временном интервале, соответствующем влиянию структурного беспорядка, был использован метод наименьших квадратов для наилучшей аппроксимации значений  $M(t)$ ,  $A(t)$  и  $M^{(2)}(t)$  выражением (38). Процедура заключалась в следующем: 1) временной интервал проявления влияния дефектов структуры разбивался на всевозможные участки  $\Delta t$ , начиная от участков с  $\Delta t = 50$  до участков с  $\Delta t = 550$ ; 2) на каждом из участков  $\Delta t$  определялись значения показателя  $\delta$  при фиксированном значении  $\omega/z$ ; 3) найденные значения  $\delta$  усреднялись по выбранным участкам с определением среднего значения  $\langle \delta \rangle$  и погрешности аппроксимации  $\Delta \delta$ ; 4) показатель  $\omega/z$  определялся



**Рис. 5.** Временные зависимости критического поведения второго момента намагниченности  $M^{(2)}$  (а) и автокорреляционной функции  $A$  (б) для системы с  $p = 0.80$

из условия минимальности значений относительных погрешностей проведенных аппроксимаций.

Наряду с аппроксимационной погрешностью  $\Delta\delta$  для показателей  $\delta$  определялась их статистическая погрешность. Для этого общее количество используемых для усреднения примесных конфигураций делилось на четыре группы. Для каждой из групп вычислялись показатели  $\theta'$ ,  $c_a$  и  $c_2$ , а затем определялись отклонения от показателей, найденных при использовании усредненных по общему количеству примесных конфигураций значений  $M(t)$ ,  $A(t)$  и  $M^{(2)}(t)$ .

В табл. 2 приведены полученные итоговые значения критических показателей и их погрешности. На основе данных значений показателей были определены динамические критические индексы  $z = 2.191(42)$  и  $\theta' = 0.127(16)$ , отношение статических критических индексов  $\beta/\nu = 0.504(24)$  и усредненное значение  $\omega_{av} = 0.256(56)$  критического индекса поправки к скейлингу.

Сопоставление данных значений динамических критических индексов  $z$  и  $\theta'$  с рассчитанными выше в рамках теоретико-полевого описания значениями  $z = 2.202(2)$  и  $\theta' = 0.106(8)$ , полученными в результате усреднения результатов применения различных методов суммирования, показывает их достаточно хорошее согласие. Заметно лучшее согласие значений  $z = 2.191(42)$  и  $\theta' = 0.127(16)$  наблюдается с результатами  $z = 2.198$  и  $\theta' = 0.120$  применения к рядам теории в (29) метода суммирования Паде–Бореля–Лероя.

Сопоставление рассчитанного нами значения  $\theta' = 0.127(16)$  со значением  $\theta' = 0.10(2)$  из работы [15], полученным для систем с различными спиновыми концентрациями, но одинаковыми начальными значениями намагниченности  $m_0 = 0.01$ , показывает их хорошее согласие в пределах статистических погрешностей измерения и погрешностей проведенных аппроксимаций, а также демонстрирует тот факт, что полученное нами асимптотическое при  $m_0 \rightarrow 0$  значение  $\theta'$  оказывается выше, чем  $\theta'(m_0 = 0.01)$  из [15]. Это объясняется тем, что  $\theta'(m_0^{(2)}) > \theta'(m_0^{(1)})$ , если для начальных намагниченностей систем справедливо неравенство  $m_0^{(2)} < m_0^{(1)}$ . Таким образом, декларируемое в работе [15] хорошее согласие найденного показателя  $\theta' = 0.10(2)$  со значением  $\theta' = 0.0867$ , полученным в [14] на основе применения метода  $\epsilon$ -разложения в двухпетлевом ренормгрупповом описании, оказывается неубедительным, так как найденное нами значение  $\theta' = 0.127(16)$  уже не согласуется с  $\theta' = 0.0867$ . Результаты проведенных нами исследований дают значительно больше оснований считать, что для слабонеупорядоченных изинговских систем реальным является значение показателя  $\theta' = 0.127(16)$ , которое оказывается больше значения  $\theta' = 0.108(2)$  для однородных изинговских систем [7, 10], а не меньше, как предсказывают результаты работ [14, 15].

Проведем теперь сопоставление полученных значений критических индексов  $z = 2.191(42)$ ,  $\beta/\nu = 0.504(24)$  и  $\omega = 0.256(56)$  с результатами исследований, проведенных в других работах. Так, найденные нами значения индексов для систем с  $p = 0.80$  находятся в достаточно хорошем соответствии с результатами работ по компьютерному моделированию, где для слабонеупорядоченных систем были получены значения  $\nu = 0.684(5)$ ,  $\beta = 0.355(3)$ ,  $\beta/\nu = 0.519(8)$ ,  $\omega = 0.370(63)$  [32],  $\nu = 0.683(3)$ ,  $\beta = 0.354(2)$ ,  $\beta/\nu = 0.518(5)$  [35],  $z = 2.20(8)$  [30], а также с результатами теоретико-полевого описания,

с помощью которого были вычислены следующие значения критических индексов:  $\nu = 0.678(10)$ ,  $\beta = 0.349(5)$ ,  $\beta/\nu = 0.515(15)$ ,  $\omega = 0.25(10)$  [24],  $z = 2.1792(13)$  [17], и результатами экспериментальных исследований структурно-неупорядоченных изинговских магнетиков, дающих  $\nu = 0.69(1)$ ,  $\beta = 0.350(9)$ ,  $\beta/\nu = 0.507(20)$  (результаты представлены в обзоре [11]),  $z = 2.18(10)$  [18].

#### 4. ВЫВОДЫ

В данной работе осуществлено как ренормгрупповое теоретико-полевое описание, так и компьютерное моделирование неравновесного критического поведения структурно-неупорядоченной ферромагнитной трехмерной модели Изинга. Проведено исследование влияния неравновесных начальных состояний системы, характеризующихся относительными значениями намагниченности  $m_0 \ll 1$ , на эволюцию структурно-неупорядоченной системы в критической точке в коротковременном режиме. Показано, что на временах  $t < t_{cr} \propto m_0^{1/(\theta' + \beta/z\nu)}$  эволюция системы из начального неравновесного состояния сопровождается ростом намагниченности системы по степенному закону  $M(t) \propto t^{\theta'}$ . В работе рассчитаны независимые динамические критические индексы  $z$  и  $\theta'$  в двухпетлевом приближении с применением к рядам теории различных методов суммирования. Как средние значения критических индексов  $z = 2.202(2)$  и  $\theta' = 0.106(8)$ , так и значения, получаемые при применении каждого метода суммирования в отдельности, оказались выше значений, вычисленных ранее в рамках метода  $\varepsilon$ -разложения в том же приближении теории.

Проведенные численные исследования методом коротковременной динамики временного поведения намагниченности  $M(t)$ , второго момента намагниченности  $M^{(2)}(t)$  и автокорреляционной функции  $A(t)$  при критической температуре выявили, что в слабонеупорядоченных системах со спиновой концентрацией  $p = 0.80$  в отличие от поведения однородных систем могут быть выявлены два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением величин  $M$ ,  $M^{(2)}$  и  $A$ , а именно, на раннем временном интервале  $t \approx [7, 50]$  ШМК/спин реализуется критическое релаксационное поведение, соответствующее поведению однородной системы и определяемое динамическими критическими индексами  $\theta' = 0.1057(17)$  и  $z = 2.065(14)$  с  $\beta/\nu = 0.534(6)$ , а лишь затем, проходя через режим кроссоверного поведения, в

интервале  $t \approx [150, 1000]$  ШМК/спин реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы с критическими индексами  $\theta' = 0.127(16)$ ,  $z = 2.191(42)$  и  $\beta/\nu = 0.504(24)$ ,  $\omega = 0.256(56)$ .

Сопоставление данных значений критических индексов с рассчитанными в настоящей работе в рамках теоретико-полевого описания,  $\theta' = 0.106(8)$  и  $z = 2.202(2)$  (усредненные результаты применения различных методов суммирования), показывает их достаточно хорошее согласие при заметно лучшем согласии с результатами применения метода Падде–Бореля–Лероя,  $\theta' = 0.120$  и  $z = 2.198$ . Сопоставление полученных значений критических индексов  $z = 2.191(42)$ ,  $\beta/\nu = 0.504(24)$  и  $\omega = 0.256(56)$  с результатами численных исследований слабонеупорядоченных систем, проведенных в других работах, также показало их хорошее соответствие в пределах погрешностей моделирования и осуществленных аппроксимаций.

Результаты проведенных нами исследований дают основания считать, что для слабонеупорядоченных изинговских систем реальными являются значения показателей  $z = 2.191(42)$ ,  $\theta' = 0.127(16)$ , которые оказываются выше значений  $z = 2.042(6)$ ,  $\theta' = 0.108(2)$  для однородных изинговских систем [7, 10]. Таким образом, наличие замороженного структурного беспорядка в изингоподобных системах приводит к еще большим по сравнению с однородными системами эффектам критического замедления и влиянию неравновесных начальных состояний на эволюцию системы, учет которых очень важен при подготовке различных материалов к исследованию их критических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы «Развитие научного потенциала высшей школы» (грант № 2.1.1/930).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio et al., Lect. Notes Phys. **492**, 184 (1997).
2. A. Crisanti and F. Ritort, J. Phys. A **36**, R181 (2003).
3. P. Calabrese and A. Gambassi, Phys. Rev. E **65**, 066120 (2002).
4. G. Schehr and R. Paul, Phys. Rev. E **72**, 016105 (2005).
5. P. Calabrese and A. Gambassi, J. Phys. A **38**, R133 (2005).

6. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmann, *Z. Phys.* **73**, 539 (1989).
7. A. Jaster, J. Mainville, L. Schulke, and B. Zheng, *J. Phys. A* **32**, 1395 (1999).
8. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, *Eur. Phys. J. B* **49**, 195 (2006).
9. D. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 304 (1989).
10. В. В. Прудников, П. В. Прудников, И. А. Калашников и др., *ЖЭТФ* **133**, 1251 (2008).
11. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
12. A. V. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
13. J. G. Kissner, *Phys. Rev. B* **46**, 2676 (1992).
14. K. Oerding and H. K. Janssen, *J. Phys. A* **28**, 4271 (1995).
15. G. Schehr and R. Paul, *J. Phys: Conf. Series* **40**, 27 (2006); arXiv:cond-mat/0511571.
16. G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, *Phys. Rev. E* **60**, 5198 (1999).
17. А. С. Криницын, В. В. Прудников, П. В. Прудников, *ТМФ* **147**, 137 (2006).
18. N. Rosov, C. Hohenemser, and M. Eibschutz, *Phys. Rev. B* **46**, 3452 (1992).
19. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435 (1977).
20. I. D. Lawrie and V. V. Prudnikov, *J. Phys. C* **17**, 1655 (1984).
21. R. Bausch, H. K. Janssen, and H. Wagner, *Z. Phys.* **24**, 113 (1976).
22. А. Н. Васильев, *Квантовополовая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике*, ПИЯФ, Санкт-Петербург (1998).
23. В. В. Прудников, С. В. Белим, А. В. Иванов и др., *ЖЭТФ* **114**, 972 (1998).
24. A. Pelissetto and E. Vicari, *Phys. Rev. B* **62**, 6393 (2000).
25. G. A. Baker, B. G. Nickel, M. S. Green et al., *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1351 (1976); *Phys. Rev. B* **17**, 1365 (1978).
26. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 95 (1977); *Phys. Rev. B* **21**, 3976 (1980).
27. S. A. Antonenko and A. I. Sokolov, *Phys. Rev. B* **51**, 1894 (1995).
28. Д. И. Казаков, О. В. Тарасов, Д. В. Ширков, *ТМФ* **38**, 15 (1979); Д. И. Казаков, В. С. Попов, *ЖЭТФ* **122**, 675 (2002).
29. И. М. Суслов, *ЖЭТФ* **120**, 5 (2001).
30. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, *ЖЭТФ* **103**, 962 (1993).
31. H.-O. Heuer, *J. Phys. A* **26**, L341 (1993).
32. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor et al., *Phys. Rev. B* **58**, 2740 (1998).
33. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, *ЖЭТФ* **132**, 417 (2007).
34. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, B. Zheng et al., *Progr. Theor. Phys.* **117**, 973 (2007).
35. P. Calabrese, V. Martin-Mayor, A. Pelissetto et al., *Phys. Rev. E* **68**, 036136 (2003).