

05

## Исследование влияния начальных состояний, анизотропии и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга

© В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.С. Лях

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

E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

Поступила в Редакцию 30 декабря 2019 г.

В окончательной редакции 30 декабря 2019 г.

Принята к публикации 10 января 2020 г.

Осуществлено численное Монте-Карло исследование влияния различных начальных состояний, магнитной анизотропии типа „легкая ось“ и дефектов структуры на неравновесное критическое поведение классической трехмерной модели Гейзенберга. Анализ временной зависимости намагниченности и автокорреляционной функции для изотропной модели Гейзенберга показал существенное влияние начальных состояний на релаксацию намагниченности и эффекты старения в поведении автокорреляционной функции, характеризующиеся аномальным замедлением релаксации и корреляции в системе с ростом времени ожидания. Исследование анизотропной модели Гейзенберга показало, что в долговременном режиме поведение намагниченности и автокорреляционной функции характеризуется критическими показателями трехмерной модели Изинга с более быстрым временным спаданием автокорреляционной функции, чем для изотропной модели. Выявлено, что присутствие дефектов структуры при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния приводит к аномально сильному замедлению автокорреляционной функции. Данные особенности в поведении автокорреляционной функции характеризуются эффектами „сверхстарения“ с показателем „сверхстарения“  $\mu = 2.6(1)$  и связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. При эволюции из высокотемпературного начального состояния дефекты структуры приводят к усилению эффектов старения в режиме старения, а в долговременном режиме их влияние оказывается несущественным.

**Ключевые слова:** неравновесная критическая динамика, модель Гейзенберга, методы Монте-Карло.

DOI: 10.21883/FTT.2020.05.49237.07M

### 1. Введение

Трехмерная классическая ферромагнитная модель Гейзенберга является одной из традиционных статистических моделей, используемых для описания фазовых переходов в самых различных спиновых системах, в частности, в таких переходных металлах как Fe, Co, Ni и их сплавах. Статическое критическое поведение систем, описываемое данной моделью, исследовалось самыми различными методами и в различных приближениях: экспериментальными методами, методом суммирования рядов высокотемпературного разложения, методами ренормгруппового описания и компьютерного моделирования методами Монте-Карло. Полученные этими методами значения критической температуры и статических критических индексов хотя и имеют некоторые различия, но в пределах статистических погрешностей практически находятся в достаточно хорошем согласии (см. обзор [1] с представленными в сводных таблицах значениями статических критических индексов со ссылками на работы, в которых они были получены).

Значительно меньшее число работ посвящено исследованию критической динамики и отсутствуют работы по изучению неравновесного критического поведения

модели. В ранних работах по ренормгрупповому описанию критической динамики различных динамических моделей (см. обзор [2]) критическая динамика изотропной модели Гейзенберга классифицировалась как модель J с сохраняющимся параметром порядка — намагниченностью и несохраняющейся энергией. Уравнение динамики намагниченности вблизи критической точки хотя и содержит релаксационную составляющую, но длинноволновая и низкочастотная динамика намагниченности определяется гидродинамической составляющей уравнения, описывающей прецессионное медленное вращательное движение намагниченности. Размерный анализ уравнения динамики намагниченности для изотропной модели Гейзенберга позволяет легко получить выражение для динамического критического индекса  $z = (d + 2 - \eta)/2$ , где  $d$  — пространственная размерность системы,  $\eta$  — критический индекс Фишера, определяющий степенное спадание корреляционной функции с расстоянием вблизи критической точки. Для трехмерной модели Гейзенберга предсказывается значение  $z \approx 5/2$ , так как значение  $\eta \approx 0.021$  (в приближении  $\varepsilon^2$  применения метода  $\varepsilon$ -разложения) является пренебрежимо малым по сравнению с  $5/2$ . Однако в магнетиках всегда присутствует дипольное взаимодействие, которое

в особенности существенно вблизи критической точки для изотропных магнетиков ввиду дальнедействующего характера дипольного взаимодействия. Влияние дипольного взаимодействия на статические свойства модели Гейзенберга изучены методом  $\varepsilon$ -разложения в работах [3–5], а на динамические свойства в работе [6]. В [6] отмечается важное свойство влияния дипольного взаимодействия на критическую динамику — оно приводит к несохранению параметра порядка и реализации релаксационной динамики намагниченности с динамическим критическим индексом  $z_d = 2 + c_d \eta_d \approx 2.022$ , где согласно работе [6]  $c_d = (27/4) \ln(4/3) - 1 \approx 0.942$ , а индекс Фишера с влиянием дипольного взаимодействия принимает значение  $\eta_d \approx 0.023$  (в приближении  $\varepsilon^2$  применения метода  $\varepsilon$ -разложения [5]). И хотя численные значения статических критических индексов слабо изменяются под влиянием дипольного взаимодействия, однако за счет изменения динамики намагниченности влияние дипольного взаимодействия на значение динамического критического индекса оказывается существенным.

Динамику модели Гейзенберга с учетом влияния дипольного взаимодействия можно сопоставить с релаксационной динамикой модели А в классификации Гальперина–Хоэнберга (обзор [2]), в которой также не сохраняются как параметр порядка, так и энергия. Для этой модели динамический критический индекс  $z = 2 + c\eta$  с  $c = 6 \ln(4/3) - 1 \approx 0.726$  и, если воспользоваться значением  $\eta \approx 0.021$ , то для модели Гейзенберга  $z_H = 2 + c\eta \approx 2.015$ , которое также оказывается достаточно близким к  $z_d$  для модели Гейзенберга с влиянием дипольного взаимодействия. В работах [7,8] при компьютерном моделировании релаксационной динамики трехмерной модели Гейзенберга методом коротковременной динамики было получены следующие значения динамического критического индекса  $z = 1.975(10)$  и  $z = 1.976(9)$ , которые согласуются в пределах статистических погрешностей со значением  $z = 1.96(6)$ , рассчитанным ранее в [9] с использованием равновесной техники моделирования автокорреляционной функции. Однако в полученных в [7,8] значениях  $z$  настораживает то, что они меньше двух и, следовательно, эти значения  $z$  должны приводить к расходимости кинетических коэффициентов, что противоречит ренормгрупповым основам релаксационной модели А и не наблюдается в эксперименте.

В настоящее время поведение систем, характеризующихся медленной динамикой, вызывает у исследователей большой интерес. Это обусловлено наблюдаемыми при медленной эволюции систем из неравновесного начального состояния свойствами старения и нарушениями флуктуационно-диссипативной теоремы [10]. Данные особенности неравновесного поведения характерны и для систем, испытывающих фазовые переходы второго рода [11–13], так как критическая динамика таких систем характеризуется аномально большими временами релаксации.

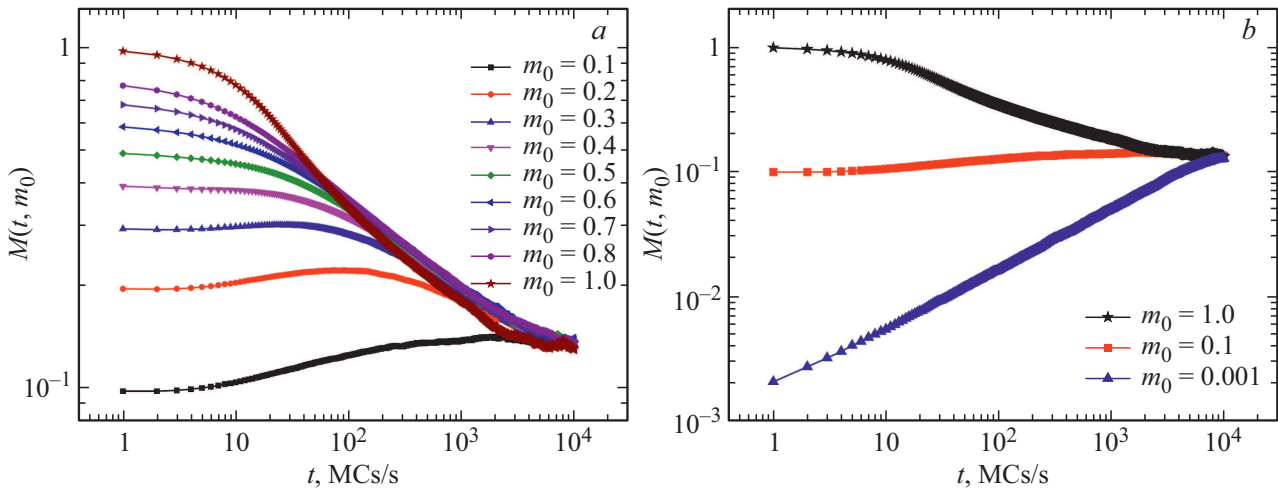
В окрестности температуры  $T_c$  фазового перехода второго рода время релаксации системы является расходящейся величиной  $t_{rel} \sim |T - T_c|^{-z\nu}$ , где  $z, \nu$  — динамический критический индекс и индекс корреляционной длины соответственно. Таким образом, системы в критической точке не достигают равновесия в течение всего релаксационного процесса. Именно на временах  $t \ll t_{rel}$  в неравновесном поведении систем проявляются эффекты старения. Эти эффекты выражаются в осуществлении двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции и функции отклика и зависимости их поведения от начальных состояний. В исследовании влияния начальных состояний различают высокотемпературное состояние, создаваемое при температурах  $T_0 \gg T_c$ , и низкотемпературное состояние при  $T_0 < T_c$ . Высокотемпературное состояние характеризуется начальной намагниченностью  $m_0 \ll 1$ , в то время как низкотемпературное полностью упорядоченное — начальной намагниченностью  $m_0 = 1$ . В настоящей работе исследуется влияние различных начальных состояний с намагниченностью в интервале  $0 < m_0 \leq 1$  на критическую релаксацию намагниченности и эволюцию автокорреляционной функции в трехмерной модели Гейзенберга с выявлением эффектов старения и вычислением значений критических показателей, определяющих асимптотическое поведение данных характеристических функций. Исследуется также влияние магнитной анизотропии типа „легкая ось“ и точечных замороженных дефектов структуры на критическую релаксацию намагниченности и проявление эффектов старения в двухвременном поведении автокорреляционных функций при эволюции из различных начальных состояний.

## 2. Исследование неравновесного критического поведения изотропной модели Гейзенберга

Гамильтониан ферромагнитной классической модели Гейзенберга задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \tag{1}$$

где  $J > 0$  характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами  $\mathbf{S}_i$ , зафиксированными в узлах простой кубической решетки. Спин  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  задается как классический единичный вектор. Моделировалась спиновая система с линейными размерами  $L = 100$  и наложенными периодическими условиями. Для моделирования односпиновых переворотов выбирался алгоритм Метрополиса, адекватно передающий релаксационную динамику системы. Для данного исследования использовалось известное из работы [14] значение критической температуры  $T_c = 1.44292(8)$ .



**Рис. 1.** График критической релаксации намагниченности  $M(t, m_0)$  (а) с различными значениями начальной намагниченности  $m_0 = 0.1–1.0$  и (б) с  $m_0 = 0.001, 0.1, 1.0$ .

В качестве характеристик неравновесного процесса выступают такие величины как намагниченность

$$\mathbf{M}(t) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{S}_i(t) \right\rangle \quad (2)$$

и двухвременная автокорреляционная функция

$$C(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \mathbf{S}_i(t) \mathbf{S}_i(t_w) \right\rangle - \mathbf{M}(t) \mathbf{M}(t_w), \quad (3)$$

где  $N_s = L^3$  характеризует число спинов в решетке, угловые скобки обозначают статистическое усреднение по реализациям начального состояния.

Вблизи критической точки намагниченность и автокорреляционная функция являются обобщенно однородными функциями времени наблюдения  $t - t_w$ , времени ожидания  $t_w$  и нового масштаба времени  $t_m \sim m_0^{-k}$ , связанного с начальной намагниченностью системы  $m_0$ , где показатель  $k = 1/(\theta' + \beta/z\nu) > 0$ , выражается через динамические  $z, \theta'$  и статические  $\beta, \nu$  критические индексы. В результате предсказывается осуществление следующих скейлинговых зависимостей для намагниченности и автокорреляционной функции [13]:

$$\overline{M}(t, t_m) \sim t^{-\beta/\nu z} G_M(t/t_m), \quad (4)$$

$$C(t, t_w, t_m) \sim (t - t_w)^{-2\beta/\nu z} G_C(t/t_w, t/t_m), \quad (5)$$

где скейлинговые функции  $G_M(t/t_m)$  и  $G_C(t/t_w, t/t_m)$  являются обобщенно-однородными функциями своих аргументов.

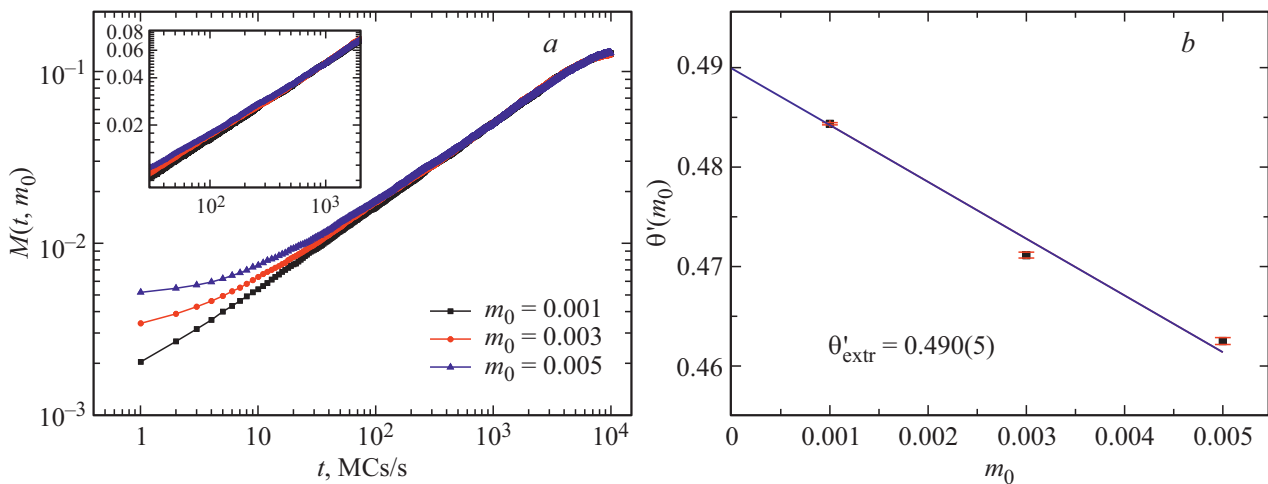
С целью проверки выполнения данных скейлинговых соотношений в неравновесном критическом поведении трехмерной модели Гейзенберга на первом этапе было проведено численное исследование релаксационных свойств намагниченности при эволюции из различных

начальных состояний. Результаты вычисления представлены на рис. 1.

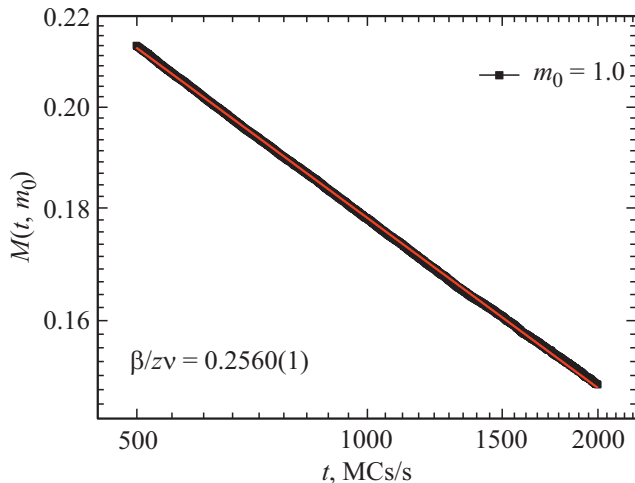
Из графиков, представленных на рис. 1, видно, что кривые релаксации для систем, стартовавших из начальных состояний  $m_0 \neq 1$ , асимптотически стремятся к кривой релаксации из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$ . При этом для систем с  $m_0 \ll 1$  на этапе неравновесной эволюции наблюдается характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом  $M(t) = m_0 t^{\theta'}$ , где  $\theta' > 0$  — показатель начальной эволюции системы [15–18]. При временах  $t > t_{cr} \sim m_0^{-k}$  данный этап эволюции сменяется режимом, характеризуемым степенной зависимостью  $M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$ . При эволюции системы из начального низкотемпературного состояния с  $m_0 = 1$  временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определяется степенной зависимостью  $M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$ .

Для определения значения критического индекса  $\theta'$ , задающего для систем с  $m_0 \ll 1$  на этапе неравновесной эволюции степенной рост намагниченности  $M(t) = m_0 t^{\theta'}$ , осуществлялось компьютерное моделирование намагниченности для начальных состояний с  $m_0 = 0.001, 0.003$  и  $0.005$ . Статистическое усреднение по реализациям начального состояния проводилось по 1000 конфигураций. Полученные графики динамической зависимости намагниченности  $M(t, m_0)$  для данных начальных состояний  $m_0$  представлены в двойном логарифмическом масштабе на рис. 2, а.

Значения показателя  $\theta'$  для каждого  $m_0$  находились с помощью линейной аппроксимации данных  $M(t, m_0)$  на временном отрезке  $t = 30–2000$  MCs/s. Вычисленные критические показатели  $\theta'(m_0)$  для различных  $m_0$  экстраполировались затем к значению  $m_0 \rightarrow 0$  (рис. 2, б). В результате проведенной экстраполяции был получено значение динамического критического индекса начальной эволюции  $\theta' = 0.490(1)$ .



**Рис. 2.** Графики начальной эволюции намагниченности  $M(t, m_0)$  (a) из высокотемпературных начальных состояний с  $m_0 = 0.001, 0.003, 0.005$  и (b) определение критического показателя  $\theta'$  путем экстраполяции  $\theta'(m_0 \rightarrow 0)$ .



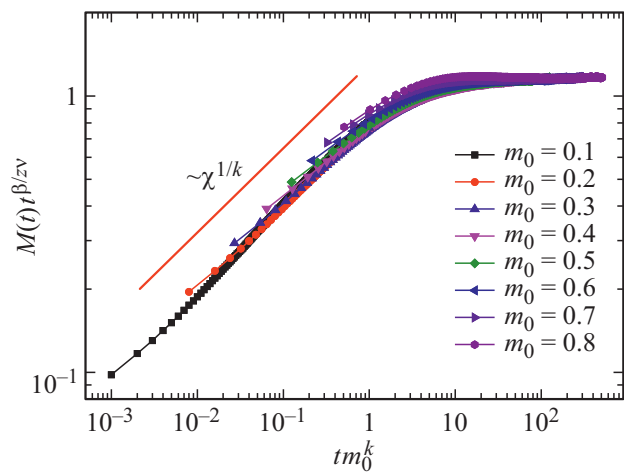
**Рис. 3.** Определение критического показателя  $\beta/zv$  путем аппроксимации данных намагниченности  $M(t)$  на отрезке  $t = 500-2000$  MCs/s при релаксации из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$ .

Значение критического показателя  $\beta/zv$  определялось на основе анализа временной зависимости намагниченности  $M(t) \sim t^{-\beta/zv}$  при эволюции системы из низкотемпературного полностью упорядоченного начального состояния с  $m_0 = 1$  (рис. 1, b). Статистическое усреднение осуществлялось по данным 1000 прогонок. Значение показателя  $\beta/zv = 0.2560(1)$  было получено в результате линейной аппроксимации данных намагниченности на временном отрезке  $t = 500-2000$  MCs/s (рис. 3).

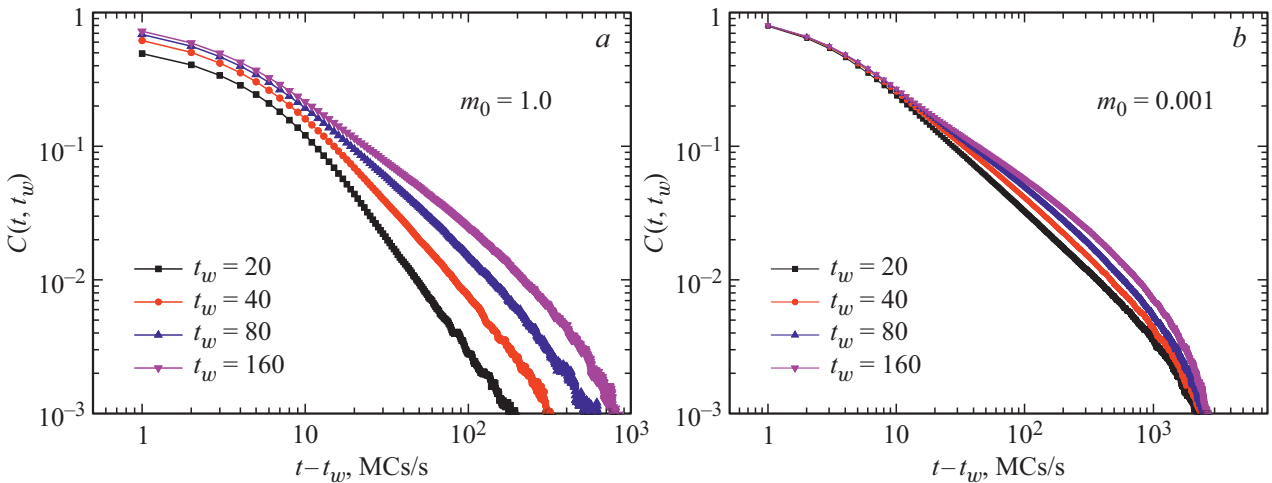
При использовании значений статических критических индексов  $\beta$  и  $\nu$ , полученных в работе [19] и дающих их отношение  $\beta/\nu = 0.521(1)$ , и значения показателя  $\beta/zv = 0.2560(1)$ , рассчитанного нами, было получено значение динамического критического индекса  $z = 2.035(4)$ . Данное значение критического ин-

декса  $z = 2.035(4)$ , большее двух, уже соответствует ренормгрупповым основам релаксационной модели А и находится в достаточно хорошем согласии со значением  $z_H = 2 + c\eta \approx 2.015$ , предсказываемым результатами применения метода  $\epsilon$ -разложения в двухпетлевом приближении [2]. Кроме того, если использовать значение  $\eta = 0.0413(16)$ , рассчитанное в работе [19] методами Монте-Карло, то получаемое при  $c = 6 \ln(4/3) - 1 \approx 0.726$  значение  $z = 2.0315(11)$  находится в очень хорошем согласии с рассчитанным нами значением динамического критического индекса  $z = 2.035(4)$ .

Значение полученного нами критического индекса начальной эволюции намагниченности  $\theta' = 0.490(1)$  может быть сопоставлено с близким значением  $\theta' = 0.482(3)$ , рассчитанным методом коротковременной динамики в работах [7,8]. В отличие от работы [8] критический индекс  $\theta'$  был получен нами на основе



**Рис. 4.** Зависимость скейлинговой функции намагниченности  $G_M(tm_0^k) = t^{\beta/zv} M(t, m_0)$  от переменной  $tm_0^k$ .

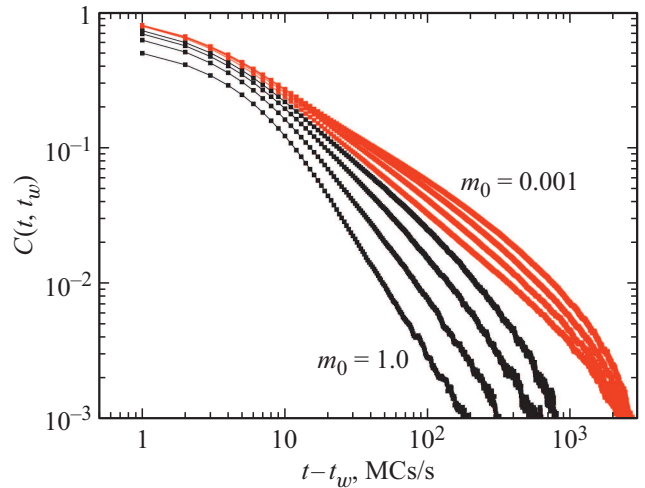


**Рис. 5.** Временная зависимость автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w = 20, 40, 80, 160$  MCs/s при эволюции системы из (a) низкотемпературного и (b) высокотемпературного начальных состояний.

моделирования системы с большим линейным размером решетки  $L = 100$  (в [8] для  $L = 40$ ) и для меньших значений начальной намагниченности  $m_0$ , что позволяет считать рассчитанное нами значение  $\theta' = 0.490(1)$  более достоверным.

На рис. 4 представлены результаты численной проверки предсказания скейлинговой зависимости (4) для намагниченности  $M(t, t_m)$  как функции начальных значений намагниченности  $m_0$ . Для скейлинговой функции  $G_M(x)$ , построенной на рис. 2, b в зависимости от переменной  $x = t/t_m = tm_0^k$  наблюдается „коллапс“ данных  $M(t, m_0)$ , полученных для различных  $m_0$ , на единой универсальной кривой при использовании полученного нами значения критического показателя  $\beta/z\nu = 0.2560(1)$ . Зависимость  $G_M(x)$  характеризуется линейным начальным участком (в двойном логарифмическом масштабе) с  $G_M(x) \sim x^{1/k}$ . Нами были получены для трехмерной модели Гейзенберга следующее значение показателя  $k = 1.340(4)$ .

На следующем этапе нами было проведено численное исследование двухвременной зависимости автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w = 20, 40, 80, 160$  MCs/s при эволюции системы из разных начальных состояний. На рис. 5, a, b представлены графики автокорреляционных функций для крайних значений начальной намагниченности  $m_0 = 1.0$  и  $m_0 = 0.001$ , соответствующих начальному низкотемпературному полностью упорядоченному состоянию и высокотемпературному начальному состоянию, соответственно. Видно проявление эффектов старения в поведении автокорреляционных функций, а именно замедление их временного спада с ростом времени ожидания  $t_w$ . При этом наблюдается более сильная зависимость автокорреляционной функции от  $t_w$  для случая эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  по сравнению со случаем эволюции из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$ .

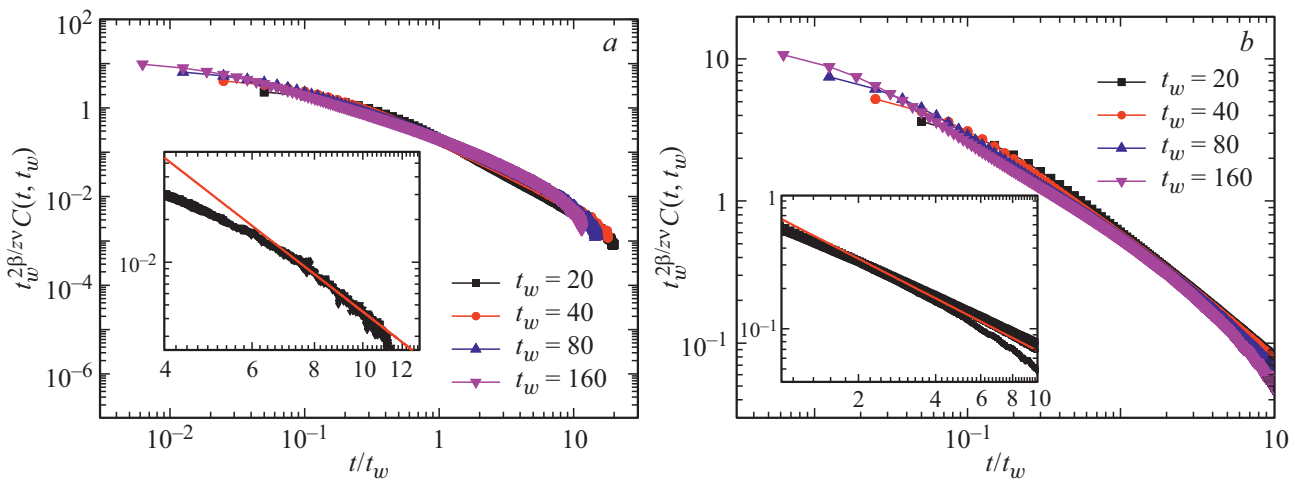


**Рис. 6.** Сопоставление временных зависимостей автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w$  при эволюции системы из низкотемпературного ( $m_0 = 1.0$ ) и высокотемпературного ( $m_0 = 0.001$ ) начальных состояний.

Сопоставление на рис. 6 графиков временной зависимости автокорреляционной функции при эволюции из начальных состояний с  $m_0 = 1.0$  и  $m_0 = 0.001$  также показывает, что временное спадание автокорреляционной функции из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$  оказывается значительно более медленным для всех рассмотренных значений  $t_w$  (примерно на порядок для малых  $t_w = 20$  и  $40$  MCs/s) по сравнению со случаем низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$ .

В режиме старения, реализуемом для времен  $t - t_w \sim t_w \gg 1$  скейлинговая зависимость автокорреляционной функции в (5) описывается соотношением [13,20]:

$$C(t, t_w, t_m) \sim t_w^{-2\beta/z\nu} G_C(t/t_w, t/t_m) \quad (6)$$



**Рис. 7.** Скейлинговые зависимости для автокорреляционной функции  $t_w^{2\beta/z\nu} C(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  при эволюции системы из (а) низкотемпературного и (б) высокотемпературного начальных состояний, демонстрирующие коллапс полученных для различных  $t_w$  данных на универсальных кривых. На вставках представлена процедура определения соответствующих критических показателей  $c_a^{LT}$  и  $c_a^{HT}$ .

со скейлинговой функцией  $G_C(t/t_w, t/t_m)$ , которая убывает на долговременном этапе изменения с  $t - t_w \gg t_w \gg 1$  в соответствии со степенным законом

$$G_C(t/t_w, t/t_m) \sim \left(\frac{t}{t_w}\right)^{-c_a} \quad (7)$$

с показателем  $c_a^{LT} = 1 + \frac{\beta(\delta+2)}{z\nu}$  при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  [12,21,22] и показателем  $c_a^{HT} = \frac{d}{z} - \theta'$  при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 \ll 1$  [23,24].

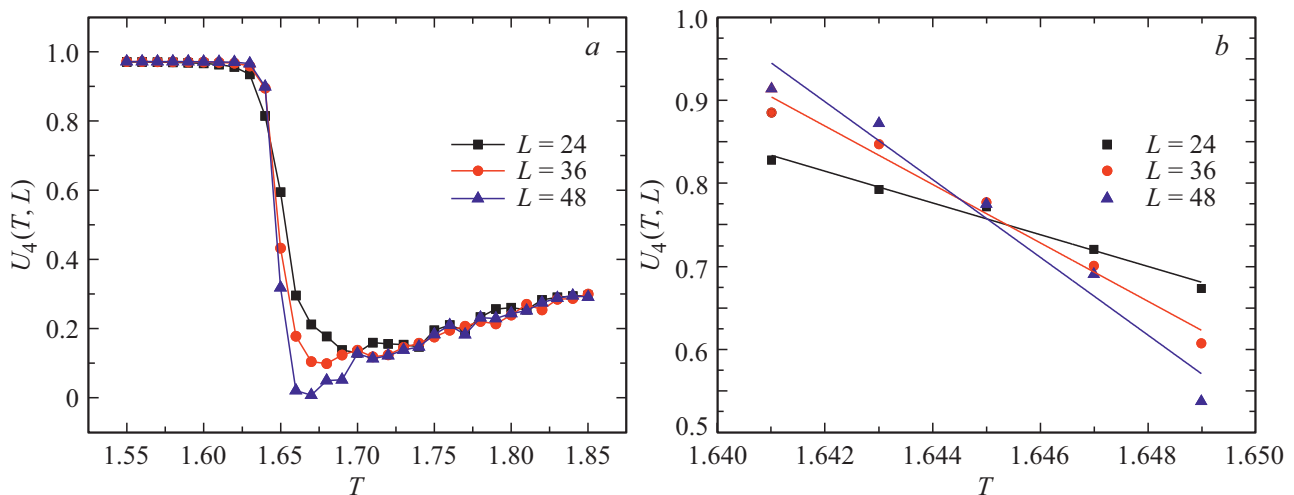
Для подтверждения скейлинговой зависимости для автокорреляционной функции (6) было осуществлено построение зависимости  $t_w^{2\beta/z\nu} C(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  с использованием полученного выше значения показателя  $\beta/z\nu = 0.2560(1)$ . Результаты представлены для случаев эволюции системы из низкотемпературного и высокотемпературного начальных состояний на рис. 7, а, б, которые демонстрируют коллапс полученных для различных  $t_w$  данных на соответствующих различных начальным состояниям универсальных кривых, характеризуемых скейлинговой функцией  $G_C(t/t_w, t/t_m)$ .

Для временных интервалов с  $t/t_w \gg 1$  были определены значения показателя  $c_a^{LT} = 2.734(7)$  при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  и показателя  $c_a^{HT} = 0.979(6)$  при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$ , которые в пределах погрешностей хорошо согласуются с теоретически предсказанными значениями  $c_a^{LT} = 1 + \frac{\beta(\delta+2)}{z\nu} \simeq 2.730$  и  $c_a^{HT} = \frac{3}{z} - \theta' \simeq 0.984$  (для трехмерной модели Гейзенберга  $\delta = 4.758(11)$ ).

### 3. Исследование неравновесного критического поведения анизотропной модели Гейзенберга

Изотропная модель Гейзенберга не учитывает эффекты анизотропии, возникающие в реальных магнитных системах за счет влияния кристаллического поля, спин-орбитального взаимодействия, магнитного диполь-дипольного взаимодействия [25]. Несмотря на то, что энергия анизотропии на два-три порядка меньше по величине энергии обменного взаимодействия, в результате действия магнитной кристаллографической анизотропии в кристалле возникают некоторые выделенные направления для ориентации намагниченности — оси легкого намагничивания или плоскости легкого намагничивания. Детальный учет эффектов магнитной кристаллографической анизотропии при их теоретическом описании является очень сложной и в настоящее время до конца нерешенной задачей. Для облегчения теоретического описания влияния эффектов магнитной анизотропии на обменное взаимодействие был предложен подход [26–28], основанный на введении анизотропной модели Гейзенберга.

Критическая динамика анизотропной модели Гейзенберга описывается релаксационной моделью А в классификации Гальперина–Хоэнберга [2], в которой сохраняются как параметр порядка, так и энергия. Для этой модели динамический критический индекс  $z = 2 + c\eta$  с  $c = 6 \ln(4/3) - 1 \simeq 0.726$  и  $\eta$  — индекс Фишера. Ожидается, что за счет одноосной анизотропии критическое поведение анизотропной модели Гейзенберга эквивалентно критическому поведению модели Изинга с  $\eta_I \simeq 0.036(1)$  [1] и  $z_I \simeq 2.026(1)$ . В работе [29] был проведен расчет динамического критического индекса  $z$  для трехмерной модели Изинга в рекорд-



**Рис. 8.** Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_4(T, L)$  для решеток с линейными размерами  $L = 24, 36, 48$  (a) и линейная аппроксимация для значений  $U_4(T, L)$  в окрестности критической температуры  $T_c = 1.64497(45)$  (b).

ном четырехпетлевом приближении в рамках теоретико-полевого подхода непосредственно для размерности системы  $d = 3$  и с применением техники суммирования Паде–Бореля получено значение  $z = 2.017$ . Проведенный в работе [30] более тонкий анализ сходимости рядов теории и их суммирования показал, что при применении метода суммирования Паде–Бореля получается значение  $z = 2.0171(1)$ , при применении метода Паде–Бореля–Лероя  $z = 2.0168(1)$  и метода конформного Паде–Бореля  $z = 2.0372(1)$ . Усреднение значений, полученных разными методами суммирования, дает  $z = 2.0237(55)$  для трехмерной модели Изинга.

В данном разделе решается задача описания неравновесного критического поведения трехмерной анизотропной модели Гейзенберга методами Монте-Карло. Исследуется влияние различных начальных состояний с намагниченностью в интервале  $0 < m_0 \leq 1$  на критическую релаксацию намагниченности в трехмерной анизотропной модели Гейзенберга и исследуются особенности двухвременных зависимостей для автокорреляционной функции при эволюции системы из высокотемпературного и низкотемпературного начальных состояний с выделением эффектов старения.

Гамильтониан ферромагнитной модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ задается выражением

$$H = -J \sum_{i,j} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \quad (8)$$

где  $J > 0$  характеризует короткодействующее обменное взаимодействие между спинами  $S_i$ , зафиксированными в узлах простой кубической решетки,  $\Delta$  — параметр анизотропии. Для данного исследования параметр анизотропии принимал значение  $\Delta = 0.63$  [31,32].

Для исследуемой модели неизвестно значение критической температуры  $T_c$ . Для нахождения критической температуры использовался метод кумулянтов Бинде-

ра [33], задаваемых соотношением

$$U_4(T, L) = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{M_4(T, L)}{M_2(T, L)^2} \right), \quad (9)$$

где  $M_n$  —  $n$ -й момент намагниченности описывается выражением

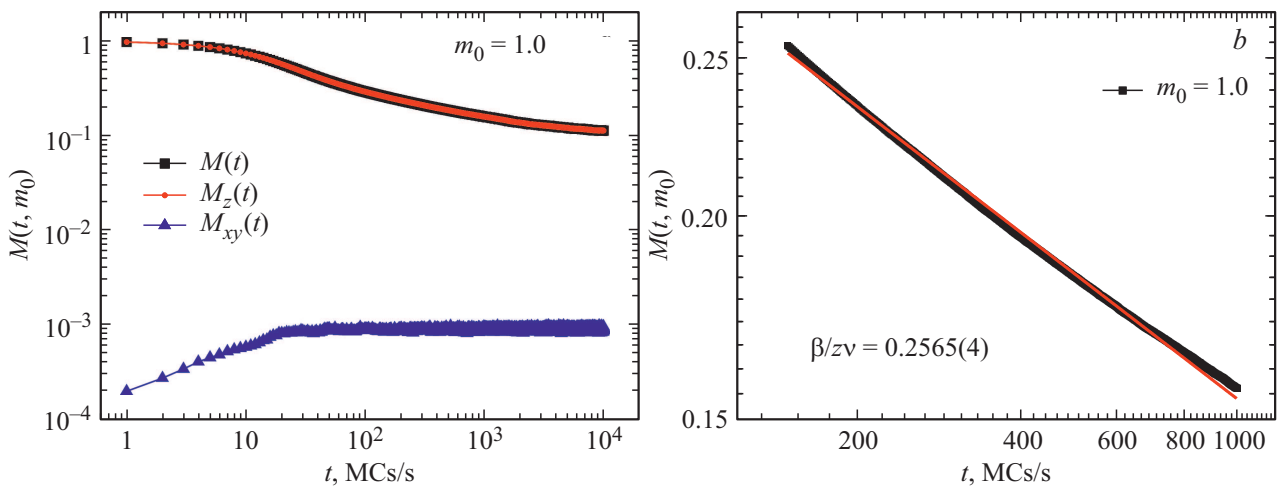
$$M_n = \left\langle \left( \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} S_i \right)^n \right\rangle. \quad (10)$$

В соотношении для  $M_n$  угловые скобки обозначают статистическое усреднение.

Кумулянт  $U_4(T, L)$  имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму  $U_4(T, L) = u(L^{1/\nu}(T - T_c))$ , которая указывает, что температурные зависимости кумулянта, полученные для систем с различными линейными размерами  $L$ , пересекаются при температуре равной  $T_c$ , в реальности в некоторой окрестности  $T_c$ , размер которой определяется статистическими погрешностями вычисления кумулянта  $U_4$ .

Для получения значения температуры фазового перехода  $T_c$  для модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ осуществлялось компьютерное моделирование равновесного поведения систем с различными линейными размерами  $L = 24, 36, 48$ . На рис. 8, a, b представлены графики вычисленной температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_4(T, L)$ . Пересечение этих кривых образует область температур, в которой находится значение критической температуры для анизотропной модели Гейзенберга. С использованием метода кумулянтов Биндера было определено значение критической температуры  $T_c = 1.64497(45)$  для данной анизотропной модели Гейзенберга.

На следующем этапе исследований моделировалось неравновесное критическое поведение анизотропной мо-



**Рис. 9.** Временная зависимость полной намагниченности  $M(t)$ ,  $z$ -составляющей намагниченности  $M_z(t)$  и  $xy$ -составляющей намагниченности  $M_{xy}(t)$  для анизотропной модели Гейзенберга (а) при эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  и результаты линейной аппроксимации графика  $M_z(t)$  на временном отрезке  $\Delta t = 150\text{--}2000$  MCs/s (b), позволяющие определить значение критического показателя  $\beta/z\nu = 0.2565(4)$ .

дели Гейзенберга и рассчитывалась временная зависимость намагниченности  $M(t)$  и двухвременная зависимость автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  при эволюции как из низкотемпературного, так и высокотемпературных начальных состояний.

Так, на рис. 9,а представлены результаты расчета критической релаксации для полной намагниченности  $M(t)$  и ее составляющих  $M_z(t)$  и  $M_{xy}(t)$  при эволюции анизотропной модели Гейзенберга из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$ . Графики наглядно демонстрируют, что для модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ медленной критической динамикой характеризуется только составляющая намагниченности  $M_z(t)$  вдоль оси анизотропии. Это приводит к тому, что правильными корреляционными свойствами неравновесного критического поведения должна характеризоваться для данной модели автокорреляционная функция для  $z$ -составляющих спинов  $S_i^z$ , т.е.

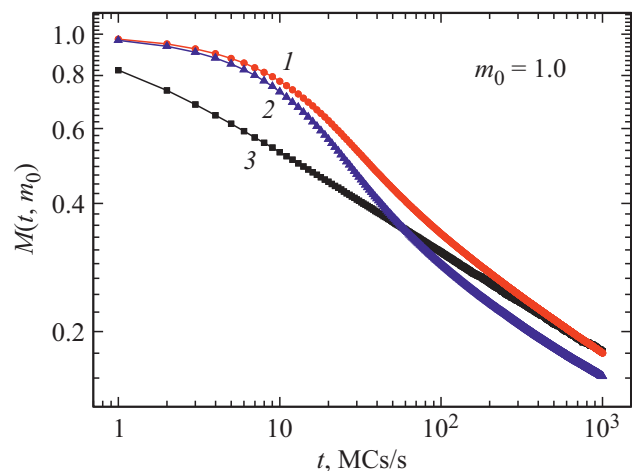
$$C_{zz}(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} S_i^z(t) S_i^z(t_w) \right\rangle - M_z(t) M_z(t_w). \quad (11)$$

Значение критического показателя  $\beta/z\nu$  определялось на основе анализа временной зависимости  $M_z(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$ . Для моделирования использовалась решетка с линейным размером  $L = 100$ . Статистическое усреднение осуществлялось по 100 прогонкам. Значение показателя  $\beta/z\nu = 0.2565(4)$  было получено в результате линейной аппроксимации данных  $z$ -составляющей намагниченности  $M_z(t)$  на временном отрезке  $\Delta t = 150\text{--}2000$  MCs/s (рис. 9, b).

Как равновесные, так и динамические критические характеристики модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ должны быть схожими с характеристиками модели Изинга, так как в обеих моделях задается выделенное направление ориентации намагниченности вдоль

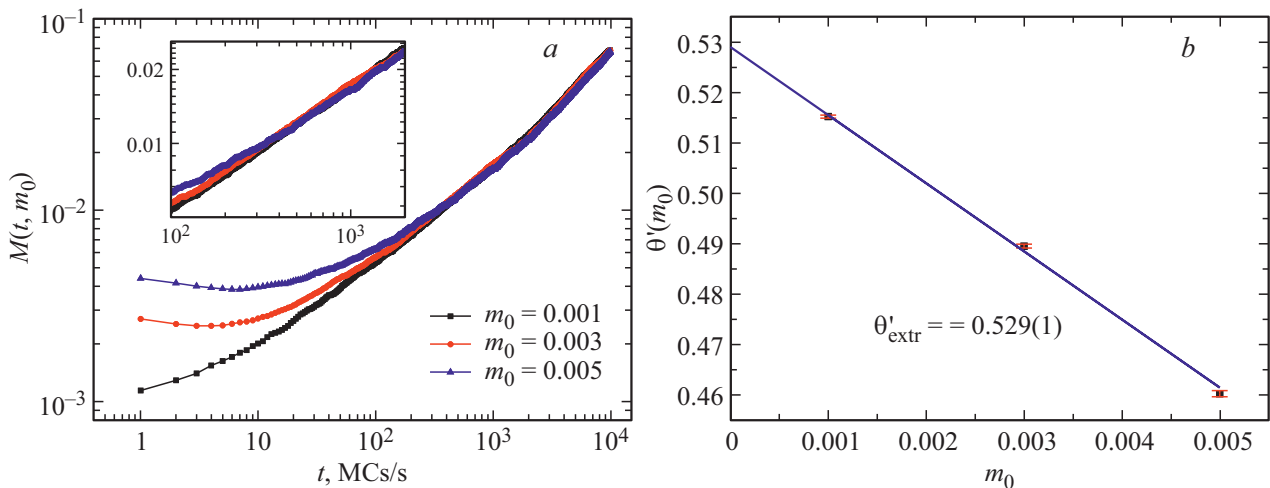
оси  $z$  (см. рис. 10). Модель Изинга может рассматриваться как предельный случай сильной одноосной анизотропии у модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ при значении параметра анизотропии  $\Delta = 1$ . Поэтому для нахождения критического показателя  $z$  нами было использовано значение критического показателя  $\beta/\nu = 0.5181(4)$  [1], соответствующее трехмерной модели Изинга. В результате, было получено значение динамического критического индекса  $z = 2.020(4)$  для трехмерной анизотропной модели Гейзенберга.

Для определения значения критического индекса  $\theta'$ , задающего для систем с  $m_0 \ll 1$  на этапе неравновесной эволюции степенной рост намагниченности  $M(t) = m_0 t^{\theta'}$ , проводилось компьютерное моделирование временной зависимости намагниченности для на-



**Рис. 10.** Динамическая зависимость намагниченности  $M(t)$  с начальной намагниченностью  $m_0 = 1.0$  для различных спиновых моделей: для анизотропной (1) и изотропной (2) моделей Гейзенберга и модели Изинга (3).



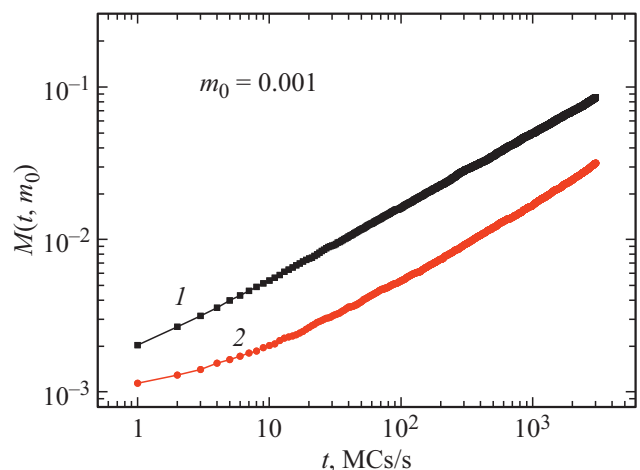


**Рис. 11.** Графики намагниченности  $M(t, m_0)$  с различными значениями начальной намагниченности (а)  $m_0 = 0.001, 0.003$  и  $0.005$ , линейная аппроксимация которых (на вставке) определяет значения показателя  $\theta'(m_0)$ ; (б) определение критического индекса  $\theta'$  при реализации экстраполяции значений  $\theta'(m_0)$  к  $m_0 \rightarrow 0$ .

чальных состояний с  $m_0 = 0.001, 0.003$  и  $0.005$ . Линейный размер решетки выбирался для моделирования  $L = 100$ . Статистическое усреднение по реализациям начального состояния проводилось по 1000 конфигураций. Полученные графики динамической зависимости намагниченности  $M(t, m_0)$  для данных начальных состояний  $m_0$  представлены в двойном логарифмическом масштабе на рис. 11, а.

Значения показателя  $\theta'(m_0)$  для каждого  $m_0$  находились с помощью линейной аппроксимации данных  $M(t, m_0)$  на временном отрезке  $\Delta t = 100-2000$  MCs/s. Вычисленные критические показатели  $\theta'(m_0)$  для различных  $m_0$  экстраполировались затем к значению  $m_0 \rightarrow 0$  (рис. 11, б). В результате проведенной экстраполяции было получено значение критического индекса начальной эволюции намагниченности  $\theta' = 0.529(1)$ .

Полученные значения критических индексов для анизотропной модели Гейзенберга были сопоставлены в таблице со значениями, соответствующими изотропной модели Гейзенберга и модели Изинга. Из таблицы видно, что значения показателей  $\beta/z\nu$  и  $z$  для анизотропной модели Гейзенберга находятся в хорошем согласии с по-

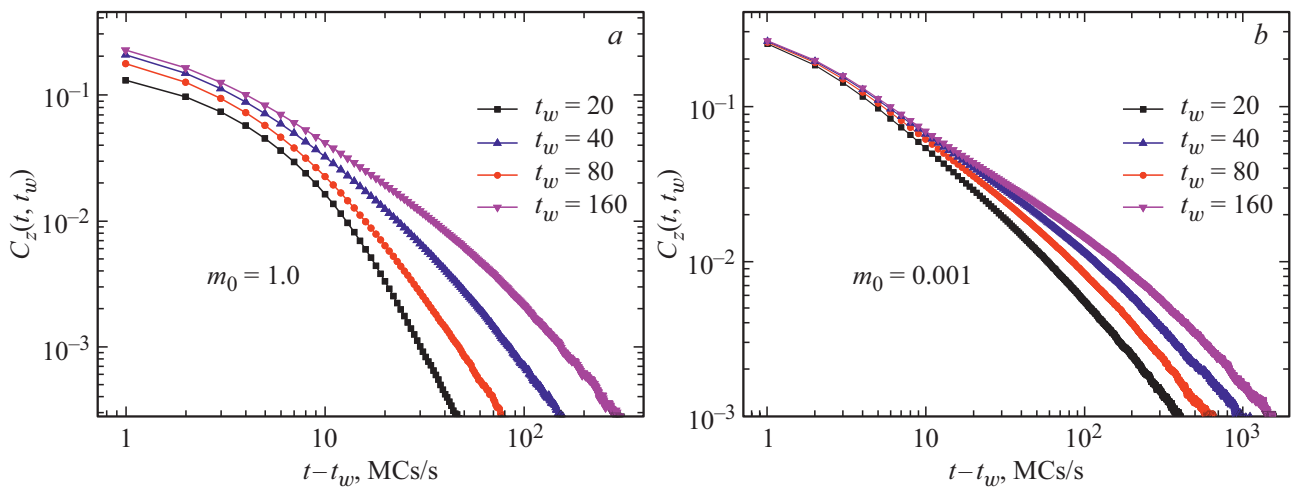


**Рис. 12.** Сопоставление временных зависимостей намагниченности  $M(T, m_0)$  с начальной намагниченностью  $m_0 = 0.001$  для изотропной (1) и анизотропной (2) моделей Гейзенберга.

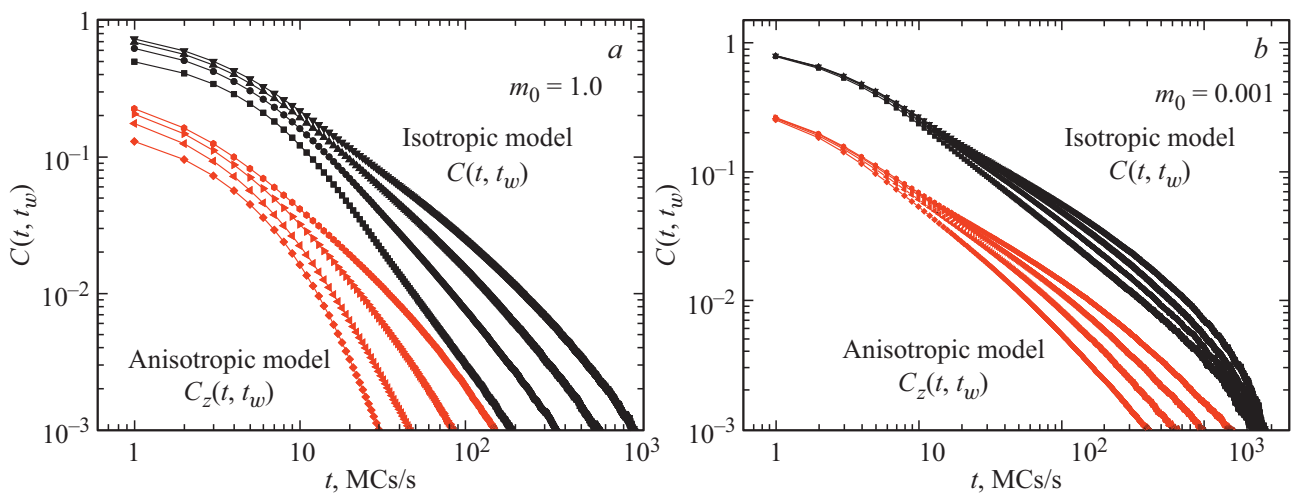
Сопоставление значений критических показателей  $\beta/z\nu, z$  и  $\theta'$  для различных спиновых моделей

Показатели	Модель Изинга	Анизотропная модель Гейзенберга	Изотропная модель Гейзенберга
$\beta/z\nu$	0.2569(2)	0.2565(4)	0.25599(5)
$z$	2.017 [29] 2.0237(55) [30]	2.020(4)	2.035(4)
$\theta'$	0.108(2) [34]	0.529(1)	0.490(1)

казателями для модели Изинга. В то же время, значение критического показателя  $\theta'$  для анизотропной модели заметно превышает значение  $\theta' = 0.108(2)$ , полученное в [34] для трехмерной модели Изинга при компьютерном моделировании методом коротковременной динамики, а также значение  $\theta' = 0.1078(22)$ , предсказываемое расчетами в рамках метода  $\epsilon$ -разложения [18]. В то же время, полученное для анизотропной модели Гейзенберга значение показателя  $\theta' = 0.529(1)$  оказывается близким к значению  $\theta' = 0.490(1)$  для изотропной модели. Это наглядно подтверждается графиками временной зависимости намагниченности на рис. 12, рассчитанными для изотропной и анизотропной моделей Гейзенберга при эволюции систем из высокотемпературного начального состояния с начальной намагниченностью  $m_0 = 0.001$ .



**Рис. 13.** Временная зависимость автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w = 20, 40, 80, 160$  MCs/s при эволюции системы из (a) низкотемпературного полностью упорядоченного начального состояния и (b) высокотемпературного начального состояния.



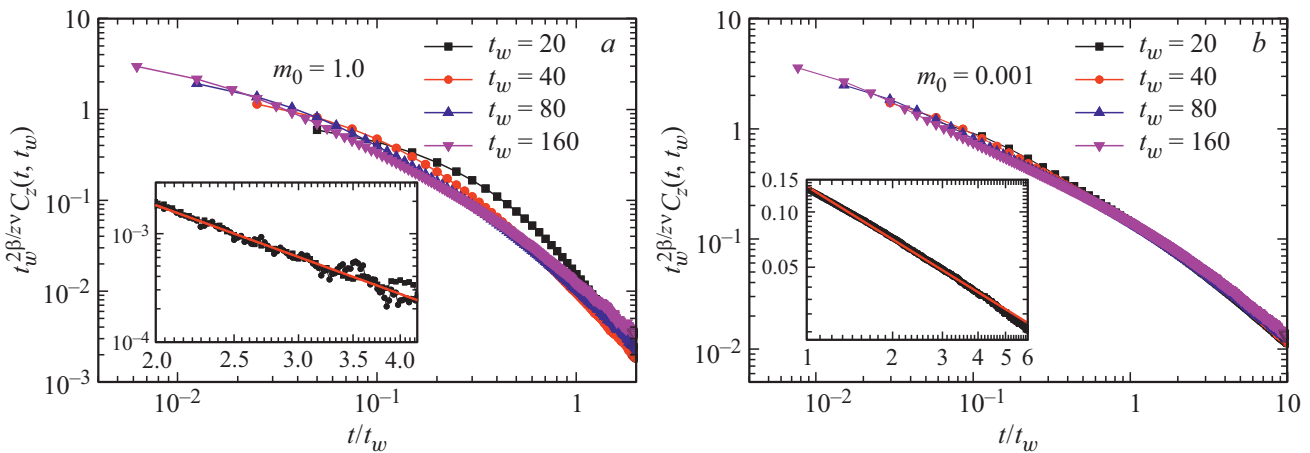
**Рис. 14.** Сопоставление временных зависимостей автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w$  при эволюции системы из (a) низкотемпературного и (b) высокотемпературного начальных состояний для анизотропной и изотропной моделей.

На следующем этапе нами было проведено численное исследование двухвременной зависимости автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w = 20, 40, 80, 160$  MCs/s при эволюции системы из разных начальных состояний. На рис. 13, a, b представлены графики автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w)$  (11) для значений начальной намагниченности  $m_0 = 1.0$  и  $m_0 = 0.001$ , соответствующих начальному низкотемпературному полностью упорядоченному состоянию и высокотемпературному начальному состоянию соответственно. Видно проявление эффектов старения в поведении автокорреляционных функций, а именно замедление их временного спада с ростом времени ожидания  $t_w$ . При этом наблюдается более сильная зависимость автокорреляционной функции от  $t_w$

для случая эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  по сравнению со случаем эволюции из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$ .

Сопоставление на рис. 13, a, b графиков  $C_{zz}(t, t_w)$  также показывает, что временное спадание автокорреляционной функции при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния оказывается значительно более медленным для всех рассмотренных значений  $t_w$  по сравнению со случаем низкотемпературного начального состояния.

Сравнивая динамические зависимости автокорреляционных функций для анизотропной и изотропной моделей, представленными на рис. 14, a, b для одних и тех же значений начальной намагниченности, можно видеть,



**Рис. 15.** Скейлинговые зависимости для автокорреляционной функции  $t_w^{2\beta/z\nu} C_{zz}(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  при эволюции системы из (a) низкотемпературного и (b) высокотемпературного начальных состояний, демонстрирующие коллапс данных, полученных для различных  $t_w$ , на универсальных кривых.

что кривые автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w)$  для анизотропной модели спадают быстрее, чем кривые автокорреляционной функции для изотропной модели как для низкотемпературного, так и высокотемпературного начальных состояний. Для автокорреляционной функции изотропной модели с эволюцией из высокотемпературного начального состояния  $m_0 \ll 1$  заметно более слабое влияние времени ожидания  $t_w$  (более слабое проявление эффектов старения), чем для анизотропной модели.

В режиме старения, реализуемом для времен  $t - t_w \sim t_w$ , автокорреляционная функция описывается соотношением [13,20]:

$$C_{zz}(t, t_w, t_m) \sim t_w^{-2\beta/z\nu} F_C(t/t_w, t/t_m) \quad (12)$$

со скейлинговой функцией  $F_C(t/t_w, t/t_m)$ , которая убывает на долговременном этапе изменения с  $t - t_w \gg t_w \gg 1$  в соответствии со степенным законом

$$F_C(t/t_w, t/t_m) \sim \left(\frac{t}{t_w}\right)^{-c_a} \quad (13)$$

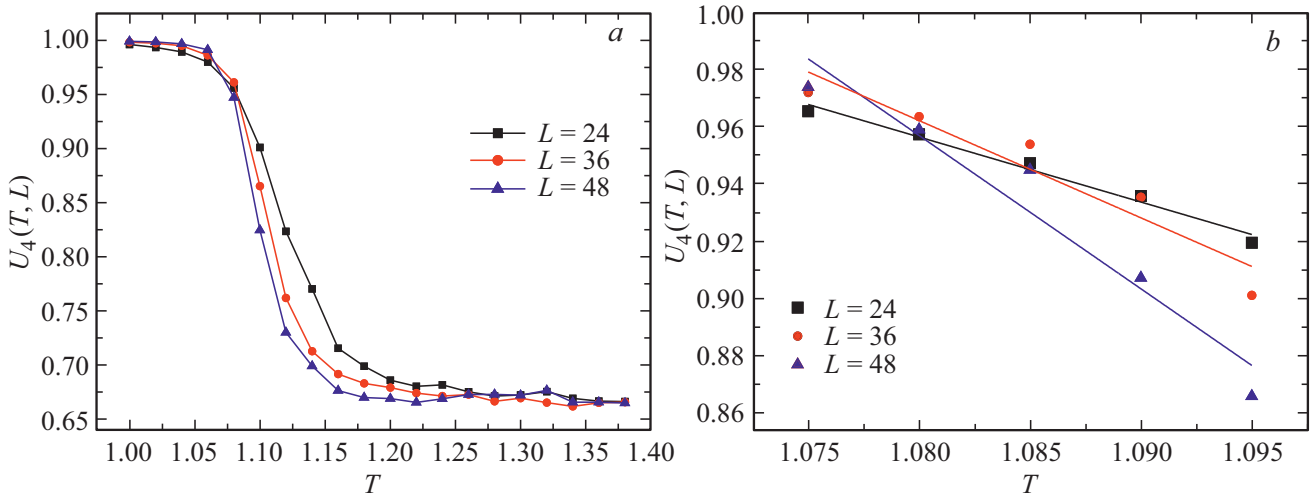
с показателем  $c_a^{LT} = 1 + \frac{\beta(\delta+2)}{z\nu}$  при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  [12,21,22] и показателем  $c_a^{HT} = \frac{d}{z} - \theta'$  при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 \ll 1$  [23,24].

Для подтверждения скейлинговой зависимости для автокорреляционной функции (12) было осуществлено построение зависимости  $t_w^{2\beta/z\nu} C_{zz}(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  с использованием полученного выше значения показателя  $\beta/z\nu = 0.2565(4)$ . На рис. 15, a, b представлены результаты расчетов для случаев эволюции системы из низкотемпературного и высокотемпературного начальных состояний, которые демонстрируют коллапс полученных для различных  $t_w$  данных на соответствующих различным начальным состояниям универсальных

кривых, характеризуемых скейлинговыми функциями  $F_C(t/t_w, t/t_m)$ . Для временных интервалов с  $t/t_w \gg 1$  были определены значения показателя  $c_a^{LT} = 2.734(7)$  при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  и показателя  $c_a^{HT} = 0.979(6)$  при эволюции системы из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$ . Данные значения показателей в пределах статистических погрешностей хорошо согласуются с теоретически предсказанными значениями  $c_a^{LT} = 1 + \frac{\beta(\delta+2)}{z\nu} \simeq 2.730$  и  $c_a^{HT} = 3/z - \theta' \simeq 0.984$  при использовании полученных значений критических индексов  $z$  и  $\theta'$  для анизотропной модели Гейзенберга и  $\beta, \nu$  для модели Изинга.

#### 4. Исследование влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение изотропной модели Гейзенберга

Изучение критического поведения структурно неупорядоченных магнитных систем со случайно распределенными немагнитными атомами примеси расширило представление о факторах, влияющих на систематизацию по классам универсальности критического поведения. Исследования показали [35], что присутствие точечных замороженных дефектов структуры изменяет критическое поведение тех систем, для которых выполняется следующий критерий  $2 - d\nu = \alpha > 0$ , где  $d$  — пространственная размерность системы,  $\nu$  — критический индекс корреляционной длины и  $\alpha$  — критический индекс теплоемкости для чистой системы. Критерий влияния точечных замороженных дефектов структуры на критическое поведение выполняется только для систем описываемых трехмерной моделью Изинга, что нашло подтверждение как в результатах экспериментальных,



**Рис. 16.** Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_4(T, L)$  (a) для решеток с линейными размерами  $L = 24, 36, 48$  и (b) линейная аппроксимация для значений  $U_4(T, L)$  в окрестности критической температуры  $T_c = 1.0813(34)$ .

так и теоретических ренормгрупповых и численных Монте-Карло исследований [36–41].

Для трехмерной модели Гейзенберга известны следующие значения критического индекса теплоемкости (см. обзор [1]):  $\alpha = -0.1339(33)$  получено методами Монте-Карло,  $\alpha = -0.122(10)$  получено ренормгрупповыми методами,  $\alpha = -0.135(20)$  измерено экспериментально. В результате, предсказывается, что влияние точечных замороженных дефектов структуры на критическое поведение модели Гейзенберга является несущественным и сохраняются значения критических показателей как в чистой модели.

Однако численное изучение особенностей влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной и двумерной моделей Изинга, двумерной XY модели позволило установить, что в данных моделях при эволюции из низкотемпературного начального состояния точечные замороженные дефекты структуры приводят к более сильному замедлению временного спада автокорреляционной функции по сравнению с ее поведением для чистых систем [21,22,42,45]. Было выявлено, что наблюдаемое сильное замедление корреляционных эффектов на временах  $t \gg t_w$  обусловлено пиннингом доменных стенок на дефектах структуры. Показано, что скейлинговая временная зависимость автокорреляционной функции для чистых трехмерной и двумерной моделей Изинга описывается соотношениями теории канонического старения, в то время как для структурно неупорядоченных моделей Изинга — теорией сверхстарения, а такая универсальная характеристика неравновесного поведения как предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения обращается в нуль [13]. В связи с этим, вопрос о влиянии дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга оказывается нетривиальным и требует детального изучения.

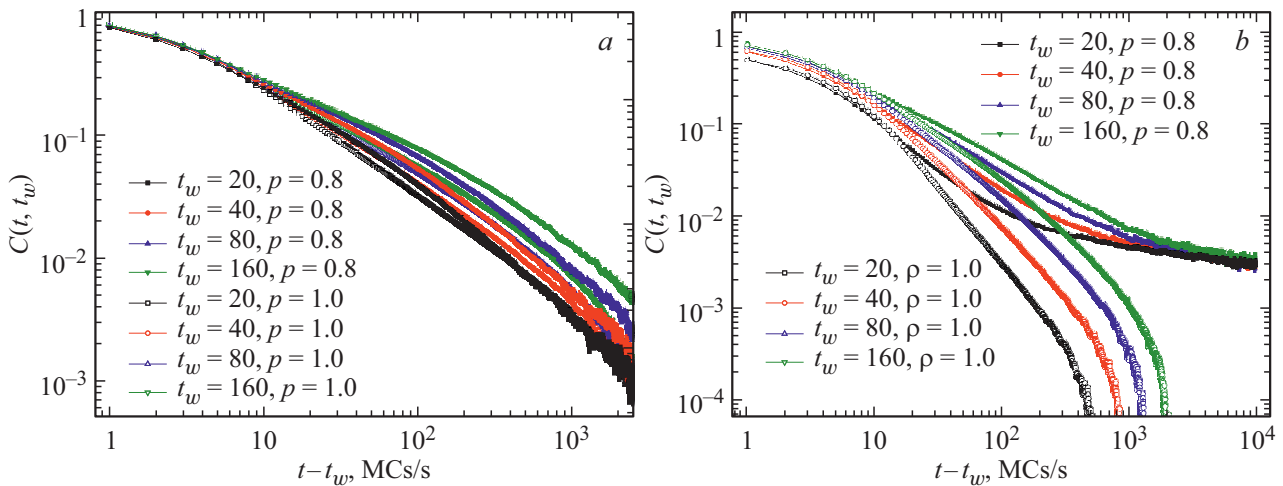
Гамильтониан структурно неупорядоченной ферромагнитной модели Гейзенберга задается выражением

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (14)$$

где числа заполнения  $p_i$  вводятся как случайные числа, принимающие значения 0 или 1:  $p_i$  принимается равным 1, если в узле  $i$  находится спин, и 0 в случае его отсутствия (магнитный атом замещен немагнитным атомом примеси). Дефекты структуры распределялись в системе каноническим образом в соответствии с функцией распределения  $P(p_i) = (1 - p)\delta(p_i) + p\delta(p_i)$ , где  $p = \langle p_i \rangle$  задает величину спиновой концентрации в системе. Положение дефектов структуры фиксируется для отдельной примесной конфигурации. Рассчитываемые термодинамические и корреляционные характеристики структурно неупорядоченной системы получают дополнительным усреднением по различным примесным конфигурациям.

Для исследования нами выбрана система со спиновой концентрацией  $p = 0.8$ . Для нахождения критической температуры такой системы использовался метод кумулянтов Биндера, задаваемых соотношениями (9)–(10) с реализацией усреднения по 100 примесным конфигурациям с 15 прогонками для каждой примесной конфигурации. На рис. 16, a, b представлены графики вычисленной температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_4(T, L)$  для решеток с линейными размерами  $L = 24, 36, 48$ . Пересечение кривых  $U_4(T, L)$  образует область температур, в которой находится значение критической температуры для неупорядоченной модели Гейзенберга со спиновой концентрацией  $p = 0.8$ . В результате было определено значение критической температуры  $T_c = 1.0813(34)$  для данной модели.

Затем было осуществлено исследование двухвременной зависимости автокорреляционной функции



**Рис. 17.** Сопоставление временных зависимостей автокорреляционной функции  $C(t, t_w)$  для различных времен ожидания  $t_w$  при эволюции чистой ( $p = 1.0$ ) и структурно неупорядоченной ( $p = 0.8$ ) моделей Гейзенберга из (a) высокотемпературного ( $m_0 = 0.001$ ) и (b) низкотемпературного ( $m_0 = 1.0$ ) начальных состояний.

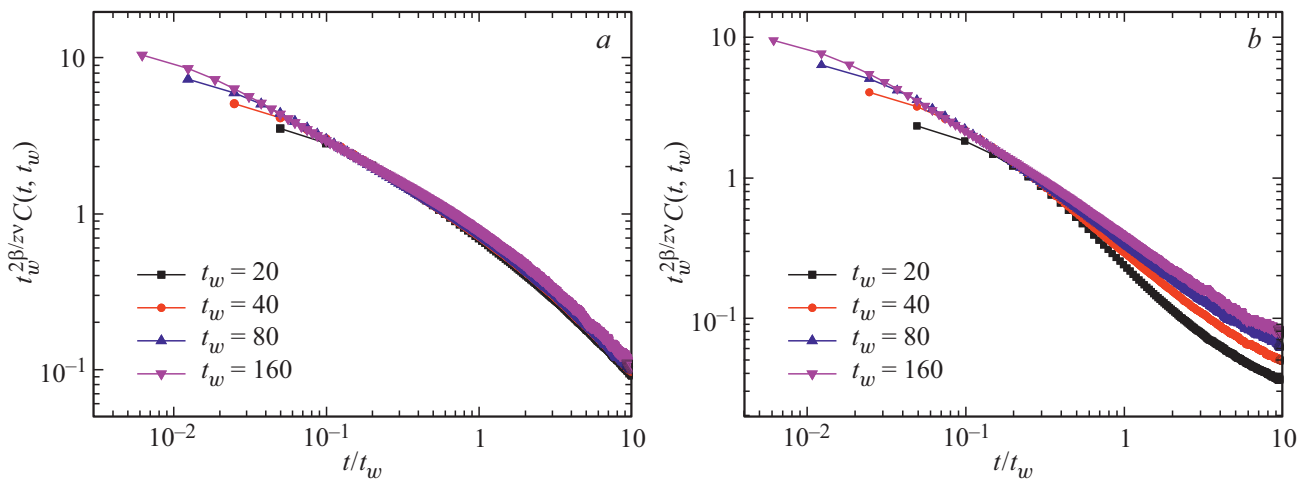
$C(t, t_w, t_m)$ , задаваемой соотношением (3), для различных времен ожидания  $t_w = 20, 40, 80, 160$  MCs/s при эволюции структурно неупорядоченной системы со спиновой концентрацией  $p = 0.8$  с линейным размером кубической решетки  $L = 100$  из разных начальных состояний. На рис. 17, a, b представлены графики автокорреляционных функций для крайних значений начальной намагниченности  $m_0 = 0.001$  и  $m_0 = 1.0$ , соответствующих высокотемпературному начальному состоянию и начальному низкотемпературному полностью упорядоченному состоянию соответственно. Наглядно видно проявление эффектов старения в поведении автокорреляционных функций, а именно замедление их временного спада с ростом времени ожидания  $t_w$ . При этом наблюдается более сильная зависимость автокорреляционной функции от  $t_w$  для случая эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  (рис. 17, b) по сравнению со случаем эволюции из высокотемпературного начального состояния с  $m_0 = 0.001$  (рис. 17, a).

Для сопоставления особенностей неравновесного критического поведения чистой ( $p = 1.0$ ) и структурно неупорядоченной ( $p = 0.8$ ) моделей Гейзенберга на рис. 17, a, b представлены временные зависимости автокорреляционной функции  $C(t, t_w, t_m)$  для обеих моделей. Видно, что при эволюции из высокотемпературного начального состояния (рис. 17, a) в режиме старения на временах  $t - t_w \sim t_w$  влияние дефектов структуры приводит к большему замедлению спада автокорреляционной функции, чем для чистой модели, и это замедление заметнее проявляется с ростом  $t_w$ . В то же время на долговременном этапе эволюции с временами  $t - t_w \gg t_w$  происходит асимптотическое сближение временных зависимостей  $C(t, t_w, t_m)$  для обеих моделей. Для случая эволюции из низкотемпературного начального состояния (рис. 17, b) для обеих моделей наблюдаются относительно близкий характер спада автокорре-

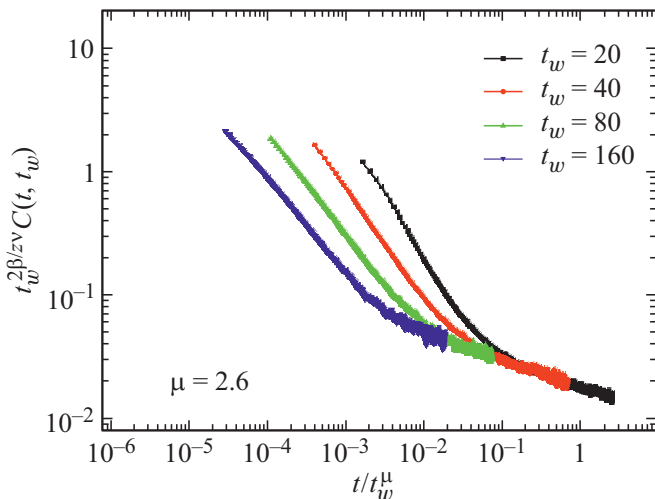
ляционной функции  $C(t, t_w, t_m)$  на временах  $t - t_w \simeq t_w$ , в то же время на долговременном этапе эволюции с временами  $t - t_w \gg t_w$  происходит аномально сильное замедление спада автокорреляционной функции для структурно неупорядоченной модели с уменьшением зависимости  $C(t, t_w, t_m)$  от времени ожидания  $t_w$ . Ранее, аналогичные эффекты сильного замедления автокорреляционной функции за счет влияния дефектов структуры при эволюции из низкотемпературного начального состояния наблюдались нами в исследованиях неравновесного критического поведения трехмерной и двумерной моделей Изинга, а также двумерной XY-модели [21,22,42,45].

Для проверки справедливости скейлинговых зависимостей для автокорреляционной функции (6)–(7), задаваемых теорией канонического старения [13], для структурно неупорядоченной модели Гейзенберга было реализовано построение зависимости  $t_w^{2\beta/z\nu} C(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  с использованием значения показателя  $\beta/z\nu = 0.2560(1)$  для чистой модели Гейзенберга. Результаты представлены на рис. 18, a, b для случаев эволюции системы из высокотемпературного и низкотемпературного начальных состояний. Видно, что в случае эволюции из высокотемпературного начального состояния (рис. 18, a) данные, полученные для различных  $t_w$ , демонстрируют коллапс на единой универсальной кривой, характеризующей скейлинговую функцию  $G_C(t/t_w, t/t_m \rightarrow 0)$ . При этом проведенный анализ ее степенного спада в долговременном режиме с  $t/t_w \gg 1$  в соответствии с соотношением (7) показал, что получаемое значение показателя  $c_a^{HT} = 0.977(8)$  находится в хорошем согласии со значением  $c_a^{HT} = 0.979(6)$  для чистой модели Гейзенберга.

В случае эволюции структурно неупорядоченной модели из низкотемпературного начального состояния (рис. 18, b) данные для скейлинговой функции



**Рис. 18.** Скейлинговые зависимости для автокорреляционной функции  $t_w t^{2\beta/z\nu} C(t, t_w, t_m)$  от  $t/t_w$  при эволюции системы из высокотемпературного (a) и низкотемпературного (b) начальных состояний.



**Рис. 19.** Эффект „сверхстарения“ наблюдаемый в скейлинговом поведении автокорреляционной функции  $t_w t^{2\beta/z\nu} C(t, t_w)$  в зависимости от  $t/t_w^\mu$  при эволюции системы из низкотемпературного начального состояния.

$G_C(t/t_w, t/t_m \gg 1) = t_w^{2\beta/z\nu} C(t, t_w, t_m)$ , полученные для различных  $t_w$ , демонстрируют коллапс лишь на временах вплоть до режима старения с  $t - t_w \sim t_w$ . В долговременном же режиме с  $t - t_w \gg t_w \gg 1$  происходит сильное замедление корреляционных эффектов и полного совпадения данных на некоторой универсальной кривой не происходит. Мы связываем эти сильные изменения в поведении автокорреляционной функции с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры, происходящим при неравновесном изменении доменной структуры системы при переходе от однодоменного состояния при  $T_0 = 0$  с  $m_0 = 1.0$  к многодоменной флуктуационной структуре, возникающей при критической температуре  $T_c$ .

Тем не менее, представление скейлинговой зависимости для автокорреляционной функции в долговременном режиме с  $t - t_w \gg t_w \gg 1$  в виде  $G_C(t/t_w^\mu)$  позволяет при значении показателя  $\mu = 2.6(1)$  получить совпадение данных для различных  $t_w$  (см. рис. 19). Такой случай скейлинговой зависимости, характеризуемой показателем  $\mu > 1$ , классифицируется в теории неравновесных процессов как явление „сверхстарения“ [1]. Из рис. 19 видно, что восстановление коллапса данных для автокорреляционной функции в долговременном режиме с  $t - t_w \gg t_w$  через введение скейлинговой функции  $G_C(t/t_w^\mu)$  разрушает „коллапс“ этих же данных для времен  $t - t_w \leq t_w$ . Это позволяет нам предположить, что для структурно неупорядоченной модели Гейзенберга при эволюции из низкотемпературного начального состояния должна реализовываться более сложная, чем в (6)–(7), форма скейлинговой зависимости автокорреляционной функции, наподобие той что была введена нами в работе [21] при описании неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга.

## 5. Заключение

В заключение отметим, что проведенные численные Монте-Карло исследования особенностей неравновесного критического поведения трехмерной классической модели Гейзенберга позволили выявить сильное влияние начальных состояний на релаксационные и корреляционные свойства системы. Показано, что кривые релаксации намагниченности для систем, стартовавших из начальных состояний с  $m_0 \neq 1$ , асимптотически стремятся к кривой релаксации намагниченности из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1$ . При этом для систем с  $m_0 \ll 1$  на этапе неравновесной эволюции наблюдается характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом  $M(t) = m_0 t^\theta$ , который на временах  $t > t_{cr} \simeq m_0^{-k}$  сменяется режимом, характери-

зумыем степенной зависимостью  $M(t) \sim t^{-\beta/(zv)}$ . При эволюции системы из начального низкотемпературного состояния с  $m_0 = 1$  временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определяется степенной зависимостью  $M(t) \sim t^{-\beta/(zv)}$ . В работе проведен расчет динамических критических индексов  $z$  и  $\theta'$ , характеризующих данные неравновесные режимы. Приведены аргументы, указывающие на то, что рассчитанные значения  $z = 2.035(4)$  и  $\theta' = 0.490(1)$  являются более достоверными по сравнению с полученными ранее результатами другими методами.

При исследовании двухвременной зависимости автокорреляционной функции были выявлены эффекты старения и их зависимость от начальных состояний системы. Показано, что при эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  наблюдается более сильная зависимость автокорреляционной функции от времени ожидания  $t_w$  по сравнению со случаем эволюции из высокотемпературных начальных состояний с  $m_0 \ll 1$ . Выявлено, что временное спадание автокорреляционной функции из высокотемпературных начальных состояний оказывается значительно более медленным по сравнению с временным спаданием автокорреляционной функции из низкотемпературного начального состояния.

Осуществлено численное подтверждение справедливости обобщенных скейлинговых зависимостей (4) и (5), характеризующих неравновесное поведение намагниченности и автокорреляционной функции в зависимости от начальных состояний и времени ожидания.

Проведенные численные Монте-Карло исследования особенностей неравновесного критического поведения трехмерной анизотропной модели Гейзенберга с анизотропией типа „легкая ось“ позволили установить, что медленной переменной системы является  $z$ -составляющая намагниченности  $M_z(t)$ , а также выявить сильное влияние начальных состояний на релаксационные свойства системы. Показано, что кривые релаксации намагниченности для систем, стартовавших из высокотемпературных начальных состояний с  $m_0 \ll 1$ , на этапе неравновесной эволюции демонстрируют характерный рост намагниченности, описываемый степенным законом  $M(t) = m_0 t^{\theta'}$ , в то время как при эволюции системы из начального низкотемпературного состояния с  $m_0 = 1.0$  временная зависимость намагниченности в критической точке сразу определяется спадающей степенной зависимостью  $M(t) \sim t^{-\beta/(zv)}$ . Проведен расчет динамических критических индексов  $z$  и  $\theta'$ , характеризующих данные неравновесные режимы. Приведены аргументы, указывающие на то, что рассчитанные значения показателей  $\beta/zv = 0.2565(4)$  и  $z = 2.020(4)$  находятся в хорошем соответствии со значениями этих показателей  $\beta/zv = 0.2569(2)$  и  $z = 2.0237(55)$  [30] для трехмерной модели Изинга. В то же время значение критического показателя  $\theta' = 0.529(1)$  для анизотропной модели заметно превышает значение  $\theta' = 0.108(2)$ , полученное в [34] и подтвержденное в [16] для трехмерной модели Изинга при компьютерном моделировании

методом коротковременной динамики, а также значение  $\theta' = 0.1078(22)$ , предсказываемое расчетами в рамках метода  $\varepsilon$ -разложения [18]. Тем не менее, значение показателя  $\theta' = 0.529(1)$  для анизотропной модели оказывается близким к значению  $\theta' = 0.490(1)$  для изотропной модели Гейзенберга.

При исследовании двухвременной зависимости  $zz$ -составляющей автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w, t_m)$  были выявлены эффекты старения и их зависимость от начальных состояний системы. Показано, что при эволюции из низкотемпературного начального состояния с  $m_0 = 1.0$  наблюдается более сильная зависимость автокорреляционной функции от времени ожидания  $t_w$  по сравнению со случаем эволюции из высокотемпературных начальных состояний с  $m_0 \ll 1$ . Выявлено, что временное спадание автокорреляционной функции из высокотемпературных начальных состояний оказывается значительно более медленным по сравнению с временным спаданием автокорреляционной функции из низкотемпературного начального состояния.

Осуществлено численное подтверждение справедливости обобщенной скейлинговой зависимости (12), характеризующей неравновесное поведение автокорреляционной функции  $C_{zz}(t, t_w, t_m)$  в зависимости от начальных состояний и времени ожидания. Проведен расчет критических показателей  $c_a^{LT} = 2.734(7)$  и  $c_a^{HT} = 0.979(6)$ , характеризующих степенное спадание скейлинговых функций в долговременном режиме (13) при эволюции системы из низкотемпературного и высокотемпературного начальных состояний.

При исследовании влияния замороженных дефектов структуры на неравновесное критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга впервые было выявлено, что при эволюции из низкотемпературного начального состояния присутствие дефектов приводит к аномально сильному замедлению автокорреляционной функции в долговременном режиме по сравнению с чистой моделью. Данные особенности в поведении автокорреляционной функции характеризуются эффектами „сверхстарения“ с показателем „сверхстарения“  $\mu = 2.6(1)$  и связаны с пиннингом доменных стенок на дефектах структуры в процессе неравновесного изменения доменной структуры системы. При эволюции из высокотемпературного начального состояния дефекты структуры приводят к усилению эффектов старения на временах  $t - t_w \sim t_w$ , а в долговременном режиме с  $t - t_w \gg t_w$  их влияние оказывается несущественным и характеризуется критическим показателем  $c_a^{HT} = 0.977(8)$ , в пределах погрешности согласующимся со значением  $c_a^{HT} = 0.979(6)$  для чистой модели Гейзенберга.

### Финансирование работы

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, проекты № 17-12-00279, 18-42-550003, 20-32-70189 и грантами МД-6868.2018.2 и

МД-2229.2020.2 Президента РФ. Для проведения расчетов были использованы ресурсы ЦКП „Центр данных ДВО РАН“, суперкомпьютерного центра РАН.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] A. Pelissetto, E. Vicari. *Phys. Rept.* **368**, 549 (2002).
- [2] P.C. Hohenberg, B.I. Halperin. *Rev. Mod. Phys.* **49**, 436 (1977).
- [3] M.E. Fisher, A. Aharony. *Phys. Rev. Lett.* **30**, 559 (1973).
- [4] A. Aharony, M.E. Fisher. *Phys. Rev. B* **8**, 3323 (1973).
- [5] A. Aharony. *Phys. Rev. B* **8**, 3342 (1973).
- [6] Г.Б. Тейтельбаум. Письма в ЖЭТФ **21**, 339 (1975).
- [7] H.A. Fernandes, J.R. Drugowich de Felicio, A.A. Caparica. *Phys. Rev. B* **72**, 054434 (2005).
- [8] H.A. Fernandes, R. da Silva, J.R. Drugowich de Felicio. *J. Stat. Mech.* **6**, P10002 (2006).
- [9] P. Peczak, D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **47**, 14260 (1993).
- [10] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo. *Lect. Not. Phys.* **492**, 184 (1997).
- [11] P. Calabrese, A. Gambassi. *J. Phys. A* **38**, R133 (2005).
- [12] P. Calabrese, A. Gambassi, F. Krzakala. *J. Stat. Mech.* **6**, P06016 (2006).
- [13] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. УФН **187**, 817 (2017).
- [14] K. Chen, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
- [15] H.K. Janssen, B. Schaub, B. Schmittmann. *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989).
- [16] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.S. Krinitsyn, A.N. Vakilov, E.A. Pospelov, M.V. Rychkov. *Phys. Rev. E* **81**, 011130 (2010).
- [17] В.В. Прудников, П.В. Прудников, И.А. Калашников, М.В. Рычков. ЖЭТФ **137**, 287 (2010).
- [18] В.В. Прудников, П.В. Прудников, И.А. Калашников, С.С. Циркин. ЖЭТФ **133**, 1251 (2008).
- [19] H.G. Ballesteros, L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe. *Phys. Lett. B* **387**, 125 (1996).
- [20] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, P.N. Maляренко, A.N. Vakilov. *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2015**, 053A01 (2015).
- [21] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Е.А. Поспелов, П.Н. Маляренко. Письма в ЖЭТФ **102**, 192 (2015).
- [22] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov. *J. Stat. Mech.* **2016**, P043303 (2016).
- [23] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Е.А. Поспелов. ЖЭТФ **145**, 462 (2014).
- [24] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, E.A. Pospelov, A.N. Vakilov. *Phys. Lett. A* **379**, 774 (2015).
- [25] В.В. Прудников, П.В. Прудников, М.В. Мамонова. Квантово-статистическая теория твердых тел. Изд-во „Лань“, СПб. (2016). 448 с.
- [26] Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов. ЖЭТФ **19**, 251 (1949).
- [27] Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов. ЖЭТФ **19**, 256 (1949).
- [28] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 530 с.
- [29] В.В. Прудников, А.В. Иванов, А.А. Федоренко. Письма в ЖЭТФ **66**, 793 (1997).
- [30] А.С. Криницын, В.В. Прудников, П.В. Прудников. ТМФ **147**, 137 (2006).
- [31] П.В. Прудников, В.В. Прудников, М.А. Медведева. Письма в ЖЭТФ **100**, 501 (2014).
- [32] P.V. Prudnikov, V.V. Prudnikov, M.A. Medvedeva, N.I. Piskunova. *J. Magn. Magn. Mater.* **387**, 387 (2015).
- [33] В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. Физматлит, М. (2009). 224 с.
- [34] A. Jaster, J. Mainville, L. Shulke, B. Zheng. *J. Phys. A* **32**, 1395 (1999).
- [35] A.V. Harris. *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
- [36] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [37] А.К. Муртазев, И.К. Камиллов, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
- [38] В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницын. ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
- [39] В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем. Наука, М. (2013). 316 с.
- [40] P.E. Berche, C. Chatelain, V. Berche, W. Janke. *Eur. Phys. J. B* **38**, 463 (2004).
- [41] M. Hasenbusch, F.P. Toldin, A. Pelissetto, E. Vicari. *J. Stat. Mech.* **2007**, P02016 (2007).
- [42] В.В. Прудников, П.В. Прудников, П.Н. Маляренко. ЖЭТФ **152**, 1293 (2017).
- [43] В.В. Прудников, П.В. Прудников, П.Н. Маляренко. ФТТ **60**, 1086 (2018).
- [44] В.В. Прудников, П.В. Прудников, Е.А. Поспелов, П.Н. Маляренко. Письма в ЖЭТФ **107**, 595 (2018).
- [45] В.В. Прудников, П.В. Прудников, И.С. Попов. ЖЭТФ **153**, 442 (2018).
- [46] M. Henkel, M. Pleimling. *Non-equilibrium phase transitions*. Springer, Heidelberg (2010). 544 p.

Редактор Ю.Э. Кутаев