

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДАГЕСТАНСКОГО НАУЧНОГО  
ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

*На правах рукописи*

**КУРБАНОВА ДЖУМА РАМАЗАНОВНА**

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
СПИНОВЫХ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ С  
КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

**01.04.07 – физика конденсированного состояния**

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
член-корреспондент РАН, доктор физико-  
математических наук, профессор  
Муртазаев Акай Курбанович

Научный консультант:  
кандидат физико-математических наук  
Рамазанов Магомедшейх Курбанович

Махачкала - 2018

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ</b> .....	4
<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	5
<b>ГЛАВА I МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО</b>	
1.1 Классический метод Монте-Карло.....	26
1.2 Алгоритм Метрополиса.....	32
1.3 Репличный алгоритм .....	34
1.4 Алгоритм Ванга-Ландау.....	38
1.5 Модели первого приближения.....	42
<b>ГЛАВА II ФРУСТРИРОВАННЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ</b>	
2.1 Конкуренция обменных взаимодействий, фрустрация.....	47
2.2 Основные положения теории конечно – размерного скейлинга.....	53
2.3 Гистограммный метод Монте-Карло.....	59
2.4 Фрустрированная модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.....	60
<b>ГЛАВА III 3D МОДЕЛИ ИЗИНГА И ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ОБЪЕМНО- ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ</b>	
3.1 Критическое поведение антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.....	83
3.2 Анализ результатов численного эксперимента.....	103

3.3 Критические свойства модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.....	109
3.4 Фазовые переходы в трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.....	119
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>127</b>
<b>ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>131</b>

## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ФП – фазовый переход

КЯ – критические явления

КИ – критические индексы

КА – критические амплитуды

ВФ – методы вычислительной физики

КРС – теория конечно-размерного скейлинга

МК – методы Монте-Карло

ОЦК – объемно-центрированная кубическая решетка

ПГУ – периодические граничные условия

## ***ВВЕДЕНИЕ***

В современной физике конденсированного состояния важное место занимают исследования фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в фрустрированных спиновых системах (под фрустрацией понимается явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствии конкурирующих взаимодействий). Известно, что спиновые системы с фрустрациями обладают необычными магнитными свойствами, имеют богатое разнообразие фаз и ФП, обусловленных сильным вырождением и высокой чувствительностью фрустрированных систем к различного рода возмущающим факторам: дополнительным взаимодействиям, слабым полям, тепловым и квантовым флуктуациям, анизотропии, дефектам и деформациям [1-4]. Однако, на сегодняшний день недостаточно хорошо изучено влияние фрустраций на тепловые, термодинамические, критические и магнитные свойства магнитных материалов. Наличие фрустраций приводит к существенному изменению ряда свойств фундаментального характера [4-7]. Среди них можно отметить проблемы, связанные с определением характера ФП, с особенностями и факторами, влияющими на формирование классов универсальности магнитного критического поведения фрустрированных спиновых систем, с влиянием фрустраций на критические и магнитные свойства магнитных материалов и др. Решение этих вопросов требует тщательного исследования материалов с фрустрациями [8].

Последние 30 лет ведутся интенсивные исследования таких систем теоретическими, экспериментальными и численными методами. Полученные результаты весьма противоречивы и вызывают бурную дискуссию среди специалистов. Особый интерес вызывают вопросы, связанные с характером ФП и влиянием фрустраций на критическое поведение спиновых систем на различных типах решеток. Имеющиеся результаты теоретических исследований не проясняют ситуацию. Часть результатов свидетельствует о наличии в таких системах ФП второго рода при определенных значениях числа компонентов

параметра порядка  $N$ , а часть – о слабо выраженном ФП первого рода [9-12]. Наиболее сложной выглядит ситуация с экспериментальными данными. Большинство результатов свидетельствует о наличии в фрустрированных спиновых системах ФП второго рода. При этом критические параметры сильно отличаются друг от друга не только рассчитанные разными авторами, но и в зависимости от экспериментального метода и методики расчета. Некоторые исследования обнаруживают явно выраженный ФП первого рода, а другие - либо слабо выраженный ФП первого рода, либо переход второго рода [13-19].

Другой важный вопрос, связанный с особенностями фрустрированных спиновых систем, заключается в зависимости характера ФП и критического поведения от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей в таких системах может привести к смене рода ФП. Особенности ФП при разных значениях соотношения обменных взаимодействий между первыми  $J_1$  и вторыми ближайшими соседями  $J_2$  известны лишь в общих чертах. При этом остается открытым вопрос о зависимости критического поведения от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $J_2$  [20-23].

Теория ФП и КЯ интенсивно развивалась Ландау и сотрудниками с 30-х годов 20-го века в рамках феноменологического подхода. Наиболее продуктивными оказались методы ренормализационной группы и  $\varepsilon$ -разложения, а также применение гипотезы подобия (скейлинга), основы которой были заложены в 60-х годах прошлого века [24-31]. На их основе было получено большинство важнейших результатов современной теории ФП и КЯ. Установлены основные закономерности, наблюдающиеся в критической области, получены соотношения между критическими индексами (КИ) и критическими амплитудами (КА), построены уравнения состояния, рассчитаны значения КИ и КА. Идеи, лежащие в основе всех этих предположений, значительно обогатили наше понимание природы КЯ. Как показывает теория, характеристики ФП тесно связаны с микроскопическими взаимодействиями частиц в системе. Мы имеем достаточно четкое представление о механизмах переходов и знаем основные

параметры, определяющие характер критического поведения системы. На самом деле таких параметров мало – это размерность пространства, число степеней свободы параметра порядка, симметрия гамильтониана и радиус характерного взаимодействия [32-36].

Существенный вклад в строгую количественную теорию КЯ в решеточных спиновых системах также внесли методы высоко- и низкотемпературных разложений [28, 37]. Тем не менее, строгой и последовательной микроскопической теории ФП второго рода и КЯ на сегодняшний день не существует [38].

Важную роль в построении общей микроскопической теории ФП играют точные аналитические решения, которые удалось получить лишь для весьма ограниченного числа решеточных моделей. В 1925 году Изинг нашел решение для случая одномерной цепочки, хотя в решении не было ФП (в цепочке атомов ФП происходит при  $T=0$ ) [39]. Прошло почти 20 лет, прежде чем Ларс Онзагер опубликовал решение для двумерного случая без внешнего поля [40] и доказал возможность существования ФП в двумерных системах. Будучи одной из немногих точно решенных моделей, она теперь служит эталоном при проверке новых теорий, приближений и численных алгоритмов. Имеют точное решение и некоторые другие модели [41]. Несмотря на многочисленные попытки исследователей, до сих пор нет точного решения для трехмерной модели Изинга.

Почему точно решаемые модели интересны? Существует несколько причин для тщательного изучения таких моделей [42]:

1. многие скрытые свойства модели не могут быть обнаружены без точной математической демонстрации;
2. мы не знаем какого-либо реального материала, который соответствует точно решенной модели, но мы знаем, что реальные материалы должны обладать физическими особенностями, которые очень близки к свойствам модели;

3. макроскопические эффекты, наблюдаемые в экспериментах, не всегда можно понять, если отсутствуют теоретические модели, представленные точными решениями.

Несмотря на значительные успехи, создание последовательной теории ФП второго рода до сих пор остается одной из актуальных проблем физики конденсированного состояния [38, 43].

В основном при описании КЯ в решеточных системах наиболее часто используются модели первого приближения: классические модели Изинга и Гейзенберга, XY-модель, модель Поттса и т.д. На их основе, с помощью теоретических и вычислительных методов, получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком диапазоне температур и других физических параметров. Исследования выполнены на решетках различного типа и пространственной размерности, а также при варьировании большого количества различных параметров. В последние годы методами вычислительной физики (ВФ) успешно исследуется и критическая область с вычислением значений КИ и КА, при этом достигаемая точность не только не уступает, но и зачастую превосходит лучшие результаты других методов [34, 44-47].

Увеличению точности методов ВФ способствуют [48-54]:

1. рост вычислительных мощностей современных ЭВМ;
2. разработка мощных высокоэффективных алгоритмов;
3. усовершенствование методов анализа данных;
4. использование теории конечно-размерного скейлинга (КРС) для расчета критических параметров.

В последние годы центр тяжести теоретических исследований переместился к изучению более реалистичных моделей с учетом многочисленных факторов, присущих реальным кристаллам и не учитываемых в рамках моделей первого приближения. К таким факторам относятся: анизотропия, примеси, диполь-дипольные взаимодействия, колебания решетки, фрустрации и др. [32, 55, 56].



Важное место занимают исследования сложных магнитных структур, таких, как сильно фрустрированные магнитные соединения и металлические наносистемы, спиновые стёкла, спиновый лед, аморфные и наногранулированные материалы, мультислойные нанопленки [57-63]. Физические свойства, ФП, классические или неколлинеарные магнитные состояния таких соединений определяются различными взаимодействиями. Сосуществование сильного изотропного обменного взаимодействия и дальнедействующих конкурирующих взаимодействий может приводить к появлению сложных магнитных структур, суперструктур, новых явлений и экзотических особенностей упорядочения. К таким явлениям относятся макроскопическое вырождение основного состояния, появление «скирмионных решеток», сложные ФП с несколькими параметрами порядка. Очень часто в таких системах, недостижимость равновесия может быть обусловлена взаимодействиями, вызывающими фрустрацию, которые приводят к возникновению экстремально высоких потенциальных барьеров, препятствующих изменению состояния. Это ещё более усиливает интерес к проявлениям такого рода в конденсированных средах.

Другим проявлением конкурирующих взаимодействий являются магнитные скирмионы, которые были обнаружены сравнительно недавно. Скирмионы образуются в магнетиках, в которых спиновые взаимодействия благоприятствуют образованию магнитной структуры с хиральной симметрией, такой как вихрь. Такие вихри возникают, когда на спины действуют конкурирующие взаимодействия, которые заставляют их поворачиваться в соответствии с направлением их соседей, но одновременно пытаются ориентировать их перпендикулярно им, из-за взаимодействия Дзялошинского-Мории [64,65]. В настоящее время обсуждается возможность применения подобных объектов для создания новых магнитных устройств хранения данных. Характеристики и свойства скирмионов делают их перспективными элементами носителя информации в будущей электронике со сверхнизким уровнем потребляемой мощности, с высокоскоростным чтением/записью и ультравысокой плотностью записи. В настоящее время проводятся в первую очередь теоретические и

численные исследования, а также разрабатываются экспериментальные подходы к конструированию магнитной памяти на основе скирмионов, т.к. уже продемонстрировано превосходство такой технологии над "беговой" памятью, основанной на движении доменной стенки [66-71].

Большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования вышеупомянутых систем сталкиваются с серьезными трудностями при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения [2, 43]. Следовательно, строгое исследование трехмерных микроскопических гамильтонианов сложных систем методами современной теоретической физики – задача чрезвычайно сложная.

На данный момент существует множество хорошо зарекомендовавших себя методов моделирования магнитных систем. Проблема нахождения минимально возможной энергии фрустрированных систем, вызванная существованием энергетических барьеров, грубостью или шероховатостью энергетического ландшафта, ее вырождение и некоторые другие причины привели к тому, что ФП и КЯ интенсивно исследуются методами ВФ – методами Монте-Карло (МК) и молекулярной динамики [44, 45, 72-74], которые позволяют успешно исследовать критические свойства систем со сложными реалистичными гамильтонианами в широком диапазоне температур и других внешних параметров. Результаты исследований показывают, что ФП и КЯ в материалах с фрустрациями в настоящее время целесообразно изучать методами МК на основе специально разработанных алгоритмов.

Одним из преимуществ методов численного эксперимента является то, что их применение не связано с малостью тех или иных параметров или другими трудностями, характерными для аналитических подходов. Погрешность контролируется в рамках самого метода. Анализ информации, полученной на основе этих методов, позволяет судить о термодинамических и кинетических свойствах системы, о ее структуре, дает совокупность характерных конфигураций или отрезок фазовой траектории в зависимости от конкретно выбранного метода и задачи. Численный эксперимент стал надежным и самостоятельным

инструментом в исследовании сложных систем наряду с физическим экспериментом и аналитическими подходами [75-77].

Использование методов ВФ требует создания довольно больших и сложных программ для ЭВМ. Почти все программы весьма специфичны, требуют от исследователей наличия навыков и компетенций программирования, поскольку не существует универсального программного обеспечения широкого назначения для решения различных задач. Все это свидетельствует о сложности постановки численных экспериментов в данной области. Тем не менее, в настоящее время методам ВФ уделяется значительное внимание, о чем свидетельствует разработка специализированных ЭВМ и процессоров, строго ориентированных на эти методы и решение конкретных задач статистической механики и молекулярной физики [72].

В данной работе рассматриваются некоторые вопросы теории статических КЯ и ФП в фрустрированных спиновых системах.

Объектами исследования являются:

- двумерная ( $2d$ ) модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
- трехмерная ( $3d$ ) модель Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
- $3d$  модель Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

Интерес к этим моделям обусловлен следующими основными причинами:

во-первых, учет взаимодействия вторых ближайших соседей может приводить к возникновению фрустраций и множества интересных физических эффектов. Известно, что фрустрированные системы во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью фрустрированных систем к различного рода возмущающим взаимодействиям [78-81, 89-97];

во-вторых, при изучении фрустрированных систем до сих пор основное внимание уделялось моделям на треугольной и гексагональной решетках [9-12]. Критические свойства и ФП фрустрированных систем на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей практически не исследованы [88-92];

в-третьих, первые попытки исследования этих моделей предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

Также до сих пор остается дискуссионным вопрос о роде ФП в спиновых системах на рассматриваемых решетках.

Рассматриваемые модели сталкиваются с серьезными трудностями при исследовании традиционными теоретическими методами, особенно в области ФП. Экспериментальные и теоретические данные, имеющиеся в литературе по критическим свойствам этих моделей, противоречивы и часто не согласуются между собой. Таким образом, исследование ФП и КЯ в этих моделях целесообразно провести на основе современных методов ВФ [78-98]. Для решения данной проблемы наиболее приспособленными и эффективными оказались репличный алгоритм [99] и алгоритм Ванга-Ландау [100, 101] метода МК. Каждый из этих методов имеет свои достоинства и не лишены также недостатков [102, 103].

В данной работе нами на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода МК проведено исследование ФП и статического критического поведения  $2d$  фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей; на основе репличного алгоритма метода МК и алгоритма Ванга-Ландау исследованы особенности ФП и критическое поведение  $3d$  антиферромагнитной модели Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

К настоящему моменту антиферромагнетики на ОЦК решетке мало изучены, а имеющиеся данные носят противоречивый характер. Степень фрустрированности и особенности ФП в данной системе вызывают множество вопросов. Также многие критические свойства этой системы остаются невыясненными. Предлагаемая работа призвана частично восполнить эти пробелы.

Таким образом, исследование ФП и КЯ, в частности фрустрированных спиновых систем, исходя из трехмерных микроскопических гамильтонианов, является **важной и актуальной** проблемой современной статистической физики решеточных систем.

**Целью работы** является исследование особенностей ФП и статических критических свойств моделей фрустрированных спиновых систем современными алгоритмами (репличным алгоритмом и алгоритмом Ванга-Ландау) метода МК. В процессе выполнения работы решались следующие **основные задачи**:

1. разработка комплекса программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать характер ФП и статические критические свойства моделей с фрустрациями;
2. исследование методом МК ФП и статических критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Определение статических критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индекса Фишера  $\eta$  этой модели на основе теории КРС;
3. изучение ФП, статических критических свойств и особенностей влияния конкурирующих обменных взаимодействий на поведение  $3d$  модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
4. исследование ФП и статических критических свойств и особенностей влияния конкурирующих обменных взаимодействий на поведение  $3d$  антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;

5. определение классов универсальности критического поведения:

- $2d$  антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
- $3d$  антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
- $3d$  антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;

### **Практическая ценность работы**

Полученные в диссертации результаты по исследованию ФП и статических критических свойств фрустрированных спиновых решеточных моделей представляют интерес для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики ФП и статистической теории конденсированного состояния. Разработанный комплекс программ для ЭВМ формирует базу, на основе которой возможны высокоточные исследования ФП и статических КЯ в фрустрированных спиновых системах.

Использование репличного алгоритма метода МК для исследования моделей фрустрированных спиновых систем показало, что репличные алгоритмы являются ценным инструментом для их исследования. Они позволяют определять с высокой степенью надежности критические параметры системы и являются значительно более эффективными по сравнению с классическим алгоритмом (алгоритм Метрополиса). Эти алгоритмы успешно справляются с проблемой локальных энергетических минимумов, для решения которой другие алгоритмы метода МК (стандартный алгоритм Метрополиса и ряд других) оказались малоэффективными.

Применение алгоритма Ванга-Ландау [101, 104] показало эффективность этого метода в преодолении энергетических барьеров путем итеративного определения плотности состояний, энергии и основного состояния системы [102, 103, 105].

Результаты численного эксперимента, полученные в данной работе, используются для чтения спецкурсов: «Исследование фазовых переходов и

критических явлений методами Монте-Карло», «Компьютерное моделирование в физике», «Методы вычислительной физики в магнетизме», а часть программ для ЭВМ – при выполнении лабораторных работ по указанным спецкурсам в Дагестанском государственном университете.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Фазовая диаграмма модели Изинга с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей на двухмерной квадратной решетке. Доказательство возникновения частично фрустрированного состояния при  $k=J_2/J_1=0.5$ . Расчет критических параметров и определение класса универсальности критического поведения в диапазоне  $k \leq 0.5$ . Расчет критических параметров  $(\alpha, \beta, \gamma, \nu, \eta)$  и демонстрация отсутствия универсальности критического поведения в интервале  $0.67 \leq k \leq 1.0$ .
2. Фазовая диаграмма модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей. Расчет критических параметров, определение класса универсальности критического поведения в интервале  $0 \leq k < 2/3$ . Определение критических параметров и доказательство отсутствия универсальности критического поведения в диапазоне  $0.75 < k \leq 1.0$ .
3. Фазовая диаграмма модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей. Расчет критических параметров и определение класса универсальности критического поведения в интервале  $0 \leq k \leq 2/3$ .
4. Доказательство отсутствия полностью фрустрированного состояния в моделях Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей.
5. Разработка сложного комплекса программ для ЭВМ, основанного на использовании современных высокоэффективных алгоритмов, позволяющих проводить высокоточные исследования статических критических явлений в моделях фрустрированных спиновых систем.

**Научную новизну и значимость** диссертации определяют **основные положения**, которые автор выносит на защиту.

**Достоверность** результатов обеспечивается строгой математической обоснованностью использованных численных методов, применением надежной теоретической базы для интерпретации полученных данных и сравнением с имеющимися в литературе данными других авторов. Результаты, приведенные в диссертации, проверены с помощью независимых методов: репличным обменным алгоритмом и алгоритмом Ванга-Ландау метода МК. Полученные результаты хорошо согласуются между собой.

### **Публикации**

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 1 свидетельстве о государственной регистрации программы для ЭВМ и 34 научных работах, в том числе в изданиях, рекомендованных ВАК РФ – 9, и реферируемых изданиях – 2.

### **Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ:**

Программа для исследования критических свойств модели Изинга на объёмно-центрированной кубической решетке репличным методом Монте-Карло / Курбанова Д.Р., А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиёв // 2017663606, дата регистрации 7.12.2017 г.

### **Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:**

1. Муртазаев, А.К. Магнитные и термодинамические свойства малых магнитных частиц с фрустрациями / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиёв, **Д.Р. Курбанова**, Я.К. Абуев // Вестник ДНЦ РАН. – 2013. – № 51. – С. 18-22.
2. Муртазаев, А.К. Модулированные структуры в магнитных наночастицах / А.К. Муртазаев, Ж.Г. Ибаев, Я.К. Абуев, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, Т.А. Тааев, Н.А. Магомедов // Вестник ДНЦ РАН. – 2013. – № 50. – С. 9-12.



3. Муртазаев, А.К. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы и критические явления в магнитных наноструктурах, описываемых трехмерной моделью Поттса / А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Магомедов, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, А.А. Муртазаева // Вестник ДГУ. – 2013. – Вып. 1. – С. 10-12.
4. Магомедов, М.А. Численное моделирование процессов распространения лазерного излучения в цилиндрическом плазменном волноводе методами вычислительной физики / М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева, Г.Ш. Шихсинов, Р.А. Муртазалиев, **Д.Р. Курбанова**, Н.А. Магомедов // Вестник ДГУ. – 2013. – Вып. 6. – С. 15-20.
5. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, **Д.Р. Курбанова** // ЖЭТФ. – 2015. – Т. 147, вып. 1. – С. 127-131.
6. Муртазаев, А.К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Известия РАН. Серия физическая. – 2015. – Т. 79, № 11. – С. 1572-1575.
7. Муртазаев, А.К. Исследование критических свойств модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // ФТТ. – 2017. – Т. 59, вып. 6. – С. 1082-1088.
8. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова**, К.Ш. Муртазаев // Инженерная физика. – 2017. – Т. 8. – С. 78-83.
9. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом

взаимодействий следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, **Д.Р. Курбанова**, М.К. Бадиев // ФТТ. – 2018. – Т. 60, вып. 6. – С. 1162-1165.

#### **Публикации в реферируемых изданиях:**

10. Murtazaev, A.K. Phase transitions in frustrated Ising antiferromagnet on a body-centered cubic lattice with next- nearest neighbor interactions / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, **D.R. Kurbanova** // Solid State Phenomena. – 2015. – Vol. 233-234. – P. 86-89.
11. Муртазаев, А.К. Модель Изинга на треугольной решетке с взаимодействиями следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Вестник ДГУ. – 2016. – Т. 31, вып. 4. – С. 64-70.

#### **Материалы конференций:**

12. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Сборник трудов 16-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-16. – Ростов-на-Дону, Туапсе. – 2013. – С. 28-30.
13. Murtazaev, A.K. Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next- nearest-neighbor interactions on a square lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, **D.R. Kurbanova** // V Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism": Nanomagnetism (EASTMAG-2013). – Vladivostok. – 2013. – С. 133.
14. Murtazaev, A.K. Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, **D.R. Kurbanova** // Book of Abstracts MISM. – Moscow. – 2014. – P. 753.
15. Murtazaev, A.K. Phase transitions in frustrated Ising antiferromagnet on a body-centered cubic lattice with next- nearest neighbor interactions / A.K. Murtazaev,

- M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova // Book of Abstracts MISM. – Moscow. – 2014. – P. 758.
16. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Огнлы, **Д.Р. Курбанова** // Сборник трудов 17-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-17. – Ростов-на-Дону, пос. Южный. – 2014. – С. 207-211.
  17. Муртазаев, А.К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». – Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный. – 2014. – С. 15-19.
  18. Муртазаев, А.К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга с учетом взаимодействий ближайших и следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Материалы VIII Всероссийской конференции «ФЭ-2014». – Махачкала. – 2014. – С. 207-211.
  19. Муртазаев, А.К. Критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Тезисы докладов II Всероссийской конференции «Нелинейные и резонансные явления в конденсированных средах». – Уфа. – 2014. – С. 30.
  20. Муртазаев, А.К. Критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Тезисы докладов II Всероссийской научной молодежной конференции «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники». – Уфа. – 2014. – С. 173.

21. Муртазаев, А.К. Магнитные и термодинамические свойства малых магнитных частиц с фрустрациями / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Тезисы докладов II Всероссийской научной молодежной конференции «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники». – Уфа. – 2014. – С. 175.
22. Бадиев, М.К. Критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / М.К. Бадиев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, **Д.Р. Курбанова** // Тезисы докладов II Всероссийской научной молодежной конференции «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники». – Уфа. – 2014. – С. 173.
23. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Огнлы, **Д.Р. Курбанова** // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» PSP&PT - 5. – Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный. – 2015. – С. 168-170.
24. **Курбанова, Д.Р.** Исследование фазовых переходов в модели Изинга на ОЦК решетке методом Монте-Карло / **Д.Р. Курбанова**, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Огнлы // Сборник трудов XI Международного семинара «Магнитные фазовые переходы», посвященного 80-летию член-корреспондента РАН Камилова И.К. – Махачкала. – 2015. – С. 140.
25. **Курбанова, Д.Р.** Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / **Д.Р. Курбанова**, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы // Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 80-летию члена-корреспондента

- РАН И.К. Камилова «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». – Махачкала. – 2015. – С. 100.
26. **Курбанова, Д.Р.** Фазовые переходы в модели Изинга на ОЦК решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / **Д.Р. Курбанова, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов** // Материалы II Всероссийской конференции «Современные проблемы физики плазмы и физической электроники». – Махачкала. – 2015. – С. 198-199.
27. Муртазаев, А.К. Критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, **Д.Р. Курбанова**, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». – Нальчик, Ростов-на-Дону, пос. Южный. – 2016. – С. 89-92.
28. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, **Д.Р. Курбанова**, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». – Нальчик, Ростов-на-Дону, пос. Южный. – 2016. – С. 93-96.
29. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы и критические свойства фрустрированной модели Изинга с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова** // Выездная сессия Научного совета РАН по физике конденсированных сред. Тезисы докладов IX Научно-практического семинара «Актуальные проблемы физики конденсированных сред». – Севастополь. – 2016. – С. 6-7.

30. Murtazaev, A.K. Ising antiferromagnetic with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a triangular lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, **D.R. Kurbanova** // Abstracts book VI Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” (EASTMAG-2016). – Krasnoyarsk. – 2016. – P. 109-110.
31. **Курбанова, Д.Р.** Фазовые переходы в фрустрированной модели Гейзенберга на ОЦК решетке / **Д.Р. Курбанова**, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, К.Ш. Муртазаев // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конд. средах». – Махачкала. – 2017. – С. 61-63.
32. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев, М.К. Бадиев, **Д.Р. Курбанова**, К.Ш. Муртазаев // Выездная сессия Научного совета РАН по физике конденсированных сред. Сборник трудов X Научно-практического семинара «Актуальные проблемы физики конденсированных сред», посвященного 110-летию Х.И. Амирханова. – Махачкала. – 2017. – С. 119-122.
33. Murtazaev, A.K. Critical phenomena Ising antiferromagnetic with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a triangular lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, **D.R. Kurbanova** // Book of Abstracts MISM. – Moscow. – 2017. – P. 306.
34. Murtazaev, A.K. Critical phenomena in the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with next-nearest-neighbor interactions / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, **D.R. Kurbanova**, M.K. Badiev, K.Sh. Murtazaev // Book of Abstracts MISM. – Moscow. – 2017. – P. 1014.

### **Апробация работы**

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях, совещаниях, семинарах: 16-м международном симпозиуме «Упорядочение в металлах и сплавах» ОМА-16 (Ростов-на-Дону, пос. Лоо, 2013); V Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism": Nanomagnetism EASTMAG-2013 (Krasnoyarsk, 2013); Moscow International Symposium on Magnetism «MISM» (Moscow, 2014); 17-м международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-17 (Ростов-на-Дону, пос. Южный, 2014); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2014); VIII Всероссийская конференция «ФЭ – 2014» (Махачкала, 2014); II Всероссийская научная молодежная конференция «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники» (Уфа, 2014); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» PSP&PT - 5 (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2015); XI Международный семинар «Магнитные фазовые переходы», посвященный 80-летию член-корреспондента РАН Камилова И.К. (Махачкала, 2015); Международная конференция, посвященная 80-летию члена-корреспондента РАН И.К. Камилова «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (Махачкала, 2015); II Всероссийская конференция «Современные проблемы физики плазмы и физической электроники» (Махачкала, 2015); Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (Нальчик, Ростов-на-Дону, Грозный, пос. Южный, 2016); IX Научно-практический семинар «Актуальные проблемы физики конденсированных сред» (Севастополь, 2016); VI Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” EASTMAG-2016 (Krasnoyarsk, 2016); Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (Махачкала, 2017); Moscow International Symposium on Magnetism «MISM» (Moscow, 2017).

### **Личный вклад автора**

Все основные результаты получены автором лично или при его активном участии. Постановка численных экспериментов и обработка результатов проведены лично автором диссертации. Обсуждение результатов и подготовка публикаций выполнены совместно с соавторами.

**Диссертация** состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

**В главе I** дано изложение классического метода Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю.

В разделе 1.1 рассмотрен классический метод МК применительно к каноническому ансамблю, а также практическая реализация процедуры метода МК для систем с дискретным и непрерывным распределением состояний. Также коротко рассмотрен вопрос о выборе начальной конфигурации системы.

В разделе 1.2 рассмотрен алгоритм Метрополиса метода МК, основанный на перевороте одного спина. Показано, что в критической области в фрустрированных системах этот алгоритм сталкивается с проблемой так называемого «критического замедления».

В разделе 1.3 дано описание репличного алгоритма метода МК. Этот алгоритм, в отличие от алгоритма Метрополиса метода МК, позволяет преодолеть проблему многочисленных долин локальных минимумов энергии, возникающую при исследовании фрустрированных систем.

В разделе 1.4 приведено описание алгоритма Ванга-Ландау метода МК. Показано, что этот алгоритм также позволяет преодолеть проблему многочисленных долин локальных минимумов энергии путем итеративного определения плотности состояний и энергии системы.

Раздел 1.5 посвящен описанию решеточных моделей, наиболее часто используемых при исследовании ФП и КЯ в решеточных системах. Рассматриваются модели как с дискретными состояниями спинов (модель Изинга), так и с непрерывным распределением состояний спинов (модель Гейзенберга).



**В главе II** дается обзор результатов теоретических и экспериментальных исследований статических критических свойств фрустрированных спиновых систем.

В разделе 2.1 рассматриваются эффекты возникновения фрустрации, обусловленные конкуренцией обменного взаимодействия и геометрией решетки.

В разделе 2.2 подробно изложены основные положения теории конечно-размерного скейлинга. Обсуждаются особенности определения статических критических индексов и критической температуры.

В разделе 2.3 приведено описание гистограммного метода МК, который позволяет надежно определить тип ФП в системе.

В разделе 2.4 представлены результаты исследования критических явлений фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

**Глава III** посвящена результатам исследования статических критических свойств антиферромагнитной модели Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

В разделе 3.1 рассматриваются термодинамические и критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

В разделе 3.2 приводится анализ результатов численного эксперимента на основе теории конечно-размерного скейлинга.

В разделе 3.3 рассмотрены результаты исследования критического поведения антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

В разделе 3.4 приведены результаты исследования природы ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

**В заключении** представлены обобщающие выводы по результатам диссертационной работы.

## ГЛАВА I МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО

### 1.1 Классический метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло основан на методе статистического моделирования, который был известен еще XVIII веке. Важным аспектом, для понимания метода МК является то, что вместо решения аналитической задачи для приближенного решения можно моделировать случайный процесс и использовать такие статистические понятия, как вероятность и математическое ожидание.

Для решения задач методом МК необходимо получить на ЭВМ последовательность выборочных значений случайной величины с заданным распределением. Такой процесс принято называть моделированием случайной величины. Случайные величины обычно моделируют с помощью преобразований одного или нескольких независимых значений, равномерно распределенных в интервале  $(0 \div 1)$  [56].

Данный метод позволяет определить все характеристики системы, многие из которых практически невозможно измерить в эксперименте. Основная идея метода заключается в том, что введение стохастических элементов, отсутствующих в исходной задаче позволяет заменить решение полностью детерминированной задачи приближенным решением [72].

В статистической физике точное решение удалось получить лишь для некоторых моделей, описывающих ФП второго рода [41]. И в основном это простейшие модели первого приближения. Так же как метод молекулярного поля [28], некоторые теоретические приближения не совсем достоверно описывают КЯ и вблизи критической температуры ( $T_c$ ) не работают. Таким образом, на основе численных методов, таких как метод высоко- и низкотемпературных разложений,  $\epsilon$  - разложения и некоторых других [24-28], было получено большинство результатов в области теории ФП и КЯ.

В последнее время, среди численных методов значительную роль играют методы МК. Их задействуют в тех случаях, когда использование аналитического

метода представляется затруднительным или совсем не возможным. Также существуют реальные физические системы, которые не поддаются теоретической обработке. Примером может служить проблема понимания специфического поведения системы со многими конкурирующими взаимодействиями. В этой ситуации единственно возможным решением представляется компьютерное моделирование. Важным преимуществом моделирования является то, что различные физические эффекты, которые одновременно присутствуют в реальных системах, могут быть рассмотрены по отдельности, что может обеспечить гораздо лучшее понимание. Следует подчеркнуть, что целью моделирования является не обеспечение лучшей «подгонки кривой» к экспериментальным данным, чем дает аналитическая теория, а в том, чтобы достичь как можно более полного понимания физических свойств и процессов, используя идеальный «эксперимент».

В 1953 году Метрополис и другие [106] применили метод МК в каноническом ансамбле для расчета уравнения состояния двумерной модели-системы твердых дисков. После чего этот метод получил широкое применение на практике. А затем Вуд и др. распространили данный метод на трехмерные системы с гладким межчастичным потенциалом Леннарда-Джонса [107]. В настоящее время различные вариации метода МК (кинетический, квантовый, кластерный, и др.) широко используются для решения задач физики, математики, биологии, экономики, социологии и т.д. Надо отметить, что в принципе, методом МК можно получить сколь угодно точные результаты в зависимости от имеющихся в распоряжении вычислительных мощностей.

В данном случае погрешность вычислений, как правило, пропорциональна  $\sqrt{D/N}$ , где  $D$  – некоторая постоянная,  $N$ -число МК испытаний и контролируется в рамках самого метода.

В методе МК система совершает случайные блуждания по конфигурационному пространству. Путем усреднения по каноническому конфигурационному ансамблю можно с успехом вычислить любую равновесную термодинамическую характеристику системы. Последовательность различных конфигураций, реализуемых в методе МК, можно рассмотреть и как временную

эволюцию системы. Как мы увидим ниже, этот динамический аспект метода МК, очень важен. Ибо это, во-первых, связано с интерпретацией и расчетом “статистических ошибок” метода. Применение метода МК к ансамблю, находящегося в произвольном состоянии, обеспечивает релаксацию ансамбля в состояние теплового равновесия. Динамическая интерпретация этого процесса позволяет понять, почему в некоторых случаях время релаксации может быть очень большим. Во-вторых, появляется возможность исследования величин, которые зависят от времени и динамических критических явлений. А это, в свою очередь, значительно расширяет область применения методов МК.

Сосредоточимся здесь на стандартном методе МК, имея в виду особенности, связанные с исследованием КЯ. В качестве примера используем модели Изинга и Гейзенберга, так как они являются наиболее наглядными примерами дискретной и непрерывной систем. В ходе изложения будем опираться на работы [85, 108].

Рассмотрим систему из  $N$  классических частиц в объеме  $V$ , при заданной температуре  $T$ . При этом каждая частица, отмеченная индексом  $i$ , будет характеризоваться множеством динамических переменных  $\{\alpha_i\}$ . Например, применительно к модели Гейзенберга  $\{\alpha_i\}$  есть единичный вектор  $\vec{S}_i$ , который ориентирован в направлении магнитного момента. Обозначим через  $\vec{x} = \vec{x}(\{\alpha_i\})$  точку фазового пространства или конфигурацию системы. Взаимодействия между частицами системы описываются гамильтонианом  $H_N(\vec{x})$ . Тогда термодинамические средние наблюдаемой величины  $A(\vec{x})$  можно представить в виде:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\vec{x} A(\vec{x}) \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}{\int d\vec{x} \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}, \quad (1.1)$$

где интеграл берется по всему фазовому пространству.

Если множество  $\{\alpha_i\}$  принимает дискретные значения, то среднее  $A(\vec{x})$  вычисляется как:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_k A(\vec{x}_k) \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}{\sum_k \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}. \quad (1.2)$$

В принципе, интегралы типа (1.1) можно вычислить стандартными способами или напрямую, случайным выбором точки  $\vec{x}_v$  в фазовом пространстве [72]. Но следует иметь в виду, что эти способы не подходят для задач статистической физики, т.к. подинтегральное выражение  $\exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)$  может изменяться на многие порядки, особенно при практически интересных температурах (вблизи критической температуры). Метрополис и др. в [106] использовали другой способ метода МК. Он основан на стохастическом переборе точек в фазовом пространстве с предпочтительной выборкой, которые дают существенный вклад в сумму (1.1). Это означает выбор состояний  $\vec{x}_v$  в соответствии с некоторой плотностью вероятности  $P(\vec{x}_v)$ :

$$P(\vec{x}_v) = \frac{\exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1} \exp(-H(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (1.3)$$

Тогда Монте-Карло оценка  $\bar{A}$  для среднего  $\langle A \rangle$  будет выражаться:

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v) P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1}^M P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (1.4)$$

Общеизвестно, что самый естественный способ выбора  $P(\vec{x}_v)$  состоит в отборе конфигураций пропорционально Больцмановскому фактору

$$P(\vec{x}_v) = P_{eq}(\vec{x}) \sim \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T), \quad (1.5)$$

при котором (1.4) превращается в среднее арифметическое

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v), \quad (1.6)$$

где  $M$ -общее число состояний, выработанных в Монте-Карло процессе.

Следует отметить, что в реальных случаях точное выражение для  $P_{eq}(\vec{x}_v)$  неизвестно. Можно произвести случайное блуждание  $\{\vec{x}_v\}$  в фазовом пространстве с помощью марковского процесса так, чтобы  $P(\{\vec{x}_v\})$  сходилась к  $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$  при  $M \rightarrow \infty$ . Данный процесс определяется переходными вероятностями  $W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})$  из состояния  $\vec{x}_v$  в состояние  $\vec{x}_{v'}$ . Для того, чтобы марковский процесс обладал свойством сходимости  $P(\{\vec{x}_v\})$  к  $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$  достаточно выполнения принципа детального равновесия:

$$P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}) \cdot W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v). \quad (1.7)$$

А переходные вероятности  $W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})$  должны удовлетворять следующим условиям:

$$1. \quad \sum_{v'} W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = 1, \quad \text{для всех } v, \quad (1.8)$$

$$2. \quad W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) > 0, \quad (1.9)$$

$$3. \quad \sum_v P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}), \quad \text{для всех } v'. \quad (1.10)$$

При соблюдении условий (1.8) - (1.10) выполнение уравнения (1.7) означает, что отношение переходных вероятностей зависит только от изменения энергии  $\delta H = H_N(\vec{x}_{v'}) - H_N(\vec{x}_v)$  при переходе из состояния  $\vec{x}_v$  в состояние  $\vec{x}_{v'}$

$$\frac{W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})}{W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v)} = \exp(-\delta H / k_B T). \quad (1.11)$$

Выражение (1.11) все еще оставляет произвол в выборе  $W$ . На практике чаще всего используются следующие две функции [72]:

$$W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\delta H / k_B T), & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \delta H \leq 0 \end{cases}, \quad (1.12)$$

ИЛИ

$$W(\bar{x}_v \rightarrow \bar{x}_{v'}) = \frac{1}{2\tau} \left( 1 - \operatorname{th} \left( \frac{\delta H}{2k_B T} \right) \right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\delta H / k_B T)}{1 + \exp(-\delta H / k_B T)}. \quad (1.13)$$

где  $\tau$  – произвольный параметр.

Рассмотрим некоторые аспекты, связанные с реализацией уравнений (1.12, 1.13) на практике и перехода из состояния  $v$  в состояние  $v'$ .

В методе МК последовательность конфигураций  $v$  и  $v'$  сильно зависит от исследуемой модели. Для модели с дискретными степенями свободы (модели Изинга  $\alpha_{v'} = -\alpha_v$ ) переход в новую конфигурацию заключается в выборе одного из возможных состояний для одной из переменных. Для моделей с непрерывной симметрией конфигурационное пространство  $\{\alpha_v\}$  представляет собой совокупность ориентаций единичных векторов (спинов) (классическая модель Гейзенберга  $\alpha_v \equiv (\theta, \varphi)$  или XY – модель).

Сложной частью моделирования методом МК является генерация последовательности случайных чисел в соответствии с вероятностями, заданными распределением Больцмана. Для получения последовательных случайных конфигураций используют Марковский процесс. Один шаг Марковской цепи заключается в попытке переворота какого-либо спина, закрепленного в узле решетки, на некоторый случайный угол. Выбор спина для поворота осуществляется случайным образом или же последовательно перебираются все спины. Если при последовательном выборе, каждый спин подвергался испытанию один раз, а при случайном выборе сделано  $N$  испытаний ( $N$  – число спинов в системе), то говорят, что выполнен один МК шаг на спин (МК шаг/спин). Для выбора в пространстве нового случайного направления используются формулы

$$\cos \theta = 2\xi_1 - 1, \quad \varphi = 2\pi \cdot \xi_2, \quad (1.14)$$

где  $0 \leq \theta < \pi$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ,  $\theta$  и  $\varphi$  – углы в сферической системе координат;  $\xi_1$  и  $\xi_2$  – случайные числа равномерно распределенные в интервале (0, 1). Для XY модели выбор нового направления осуществляется на плоскости  $\varphi = 2\pi\xi_1$ . Предпочтительно новую степень свободы выбирать из интервала вблизи

предыдущего значения. В последующем этот интервал может быть подобран так, чтобы средняя скорость переходов была оптимальной. Тогда

$$\varphi'_v = \varphi_v + \Delta\varphi(2\xi - 1). \quad (1.15)$$

В некоторых случаях возникает необходимость выбора точек в фазовом пространстве в соответствии с заданной закономерностью. Для этого создается алгоритм, который генерирует  $\varphi'_v$  пропорционально распределению вероятности  $P(\varphi_v) \sim \exp[-V(\varphi_i)/k_B T]$  [56].

Невозможно описать все варианты перехода из  $\vec{x}_v$  в  $\vec{x}'_v$ . В зависимости от типа задачи можно определить последовательность конфигураций и применить его к самым разным проблемам.

Эффективность расчета и статистических ошибок метода МК сильно зависит от выбора начальной конфигурации системы. Чаще всего задают случайную начальную конфигурацию, или по какому-либо упорядоченному принципу. При этом необходимо учесть, что выбор конкретного вида начальной конфигурации может сильно повлиять на время релаксации моделируемых систем. Данный вопрос очень актуален для систем с «замороженными» спиновыми конфигурациями (спиновые стекла или модели, в которых ФП происходит без возникновения дальнего порядка, но с расходящейся восприимчивостью (XY-модель)) [72]. Поэтому, наличие предварительной информации о статистических свойствах исследуемой модели может значительно облегчить решение вопроса о выборе начальной конфигурации. Хотя, можно задать любую начальную конфигурацию, при наличии неограниченного «машинного времени».

## 1.2 Алгоритм Метрополиса

Метод МК в компьютерном моделировании [106] является одним из основополагающих методов статистической физики на протяжении многих лет, особенно в изучении ФП.



При интегрировании по фазовому пространству в классическом методе МК приходится учитывать большое количество расчетных точек с малыми весовыми коэффициентами, что сильно увеличивает время расчета. Для сокращения времени расчета был разработан алгоритм Метрополиса [106].

Последовательность вычисления средних значений в алгоритме Метрополиса следующая: случайным образом изменяется состояние системы и сравниваются значения энергий системы до и после изменения. Если данное изменение приводит к понижению энергии системы, то новое состояние принимается. В противном случае новое состояние принимается с вероятностью равной  $\exp(-\Delta E / k_B T)$ , т.е.

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min\left(\frac{P(E_i)}{P(E_j)}, 1\right). \quad (1.16)$$

При моделировании температурного поведения системы вероятность энергии конфигурации определяется согласно каноническому распределению Гиббса:

$$P(E_i) = \frac{e^{-E_i / k_B T}}{Z}. \quad (1.17)$$

Объединив уравнения (1.16) и (1.17), получим

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min\left(\frac{e^{-E_j / k_B T}}{e^{-E_i / k_B T}}, 1\right) = \min\left(\exp\left[-\frac{E_j - E_i}{k_B T}\right], 1\right) = \min\left(\exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right], 1\right). \quad (1.18)$$

где  $\Delta E$  - изменение энергетического уровня системы в результате смены конфигурации,  $T$  - абсолютная температура. Если новое состояние не принимается, то возвращаемся к предыдущему. Среднее значение интересующей характеристики по данному алгоритму находится как среднее арифметическое из полученных значений данной характеристики по всей последовательности состояний:

$$F = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F_j. \quad (1.19)$$

где  $F_j$  - интересующая нас величина на  $j$ -й итерации. Определенное таким образом среднее значение является также средним по равновесному распределению [106].

Сходимость алгоритма достигается путем выполнения большого числа шагов (случайных блужданий по пространству состояний системы) до момента, пока среднеквадратичное отклонение не достигнет определенного минимального заданного значения, устанавливаемого индивидуально в зависимости от вычислительных возможностей и конкретной задачи.

Однако, алгоритм Метрополиса имеет недостаток. При температуре близкой к температуре ФП происходит критическое замедление алгоритма. В этой точке число шагов, необходимое для достижения сходимости, возрастает экспоненциально. Это проблема еще более актуальна для систем, в которых наблюдается фрустрированное состояние. Поэтому для систем с большим количеством локальных минимумов энергии (например, фрустрированные магнитные системы) был предложен репличный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау метода МК [100, 101, 110].

### 1.3 Репличный алгоритм

Методы МК являются ценным инструментом для изучения классических систем. Об этом свидетельствуют многочисленные исследования, выполненные этими методами [43, 46, 111, 112]. Однако вблизи критической точки мы сталкиваемся с проблемой так называемого «критического замедления». Критическое замедление является одним из наиболее серьезных источников трудностей при исследовании ФП и КЯ методами МК.

Согласно современным представлениям теории ФП и КЯ, время релаксации системы в точке фазового перехода  $T_c$  расходуется как [1, 3]:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1.20)$$

где  $\xi$  – есть корреляционная длина  $\xi \sim (T/T_c - 1)^{-\nu}$ ,  $z$  – динамический критический индекс.

Для многих моделей характерное значение  $z \approx 2$  [24, 26]. Таким образом, при  $T \rightarrow T_c$  время релаксации системы очень быстро растет. Увеличение времени

релаксации ( $\tau \rightarrow \infty$ ) делает описанный выше стандартный алгоритм метода МК не эффективным вблизи точек ФП второго рода. Эта неэффективность обусловлена тем, что в алгоритме Метрополиса, МК испытание заключается в попытке переворота одного спина, тогда как эффекты, связанные с ФП обусловлены флуктуациями спиновых кластеров больших размеров. Для систем с конечными размерами, используемых при компьютерном моделировании, размеры спиновых кластеров ограничены размерами самой системы  $L$  [45]. В этом случае при  $T = T_c$ :

$$\tau \sim L^z. \quad (1.21)$$

В настоящее время предложен ряд новых алгоритмов для метода МК, позволяющих в той или иной мере преодолеть проблему критического замедления [48-51, 113-120].

Для исследования фрустрированных спиновых систем наиболее эффективным считается репличный обменный алгоритм метода МК. Об этом свидетельствуют исследования спиновых стекол и молекулярных белковых соединений, проведенные на основе этого алгоритма [99, 116, 117].

Репличный обменный алгоритм метода МК был развит для параллельного моделирования системы при разных температурах [116, 117].

Рассмотрим систему, которая состоит из  $M$  невзаимодействующих реплик в каноническом ансамбле, которые имеют разные температуры  $T_m$  ( $m=1, 2, \dots, M$ ). Реплики в системе создаются таким образом, чтобы каждой реплике соответствовали разные температуры. Это соответствие между репликами и температурами можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} i = i(m) \equiv f(m), \\ m = m(i) \equiv f^{-1}(i), \end{cases} \quad (1.22)$$

где  $f(m)$  - функция перестановки  $m$ ,  $f^{-1}(i)$  ее инверсия.

Обозначим через  $X = \{x_1^{[1]}, \dots, x_M^{[M]}\} = \{x_{m(1)}^{[1]}, \dots, x_{m(M)}^{[M]}\}$  множество состояний в обобщенном ансамбле. Состояние  $X$  определяется набором  $M$  координат  $q^{[i]}$  и импульсов  $p^{[i]}$  для  $N$  атомов в реплике  $i$  при температуре  $T_m$  [99]:

$$x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m. \quad (1.23)$$

Поскольку реплики не взаимодействуют между собой, то вероятность для состояния  $X$  в этом обобщенном ансамбле пропорциональна больцмановскому фактору для каждой реплики [99]:

$$W(X) = \exp\left\{-\sum_{i=1}^M \beta_{m(i)} H(q^{[i]}, p^{[i]})\right\} = \exp\left\{-\sum_{m=1}^M \beta_m H(q^{[i(m)]}, p^{[i(m)]})\right\}, \quad (1.24)$$

где  $i(m)$  и  $m(i)$  функции перестановки.

Рассмотрим обмен пары реплик в обобщенном ансамбле. Предположим, что мы обмениваем реплики  $i$  и  $j$  с температурами  $T_m$  и  $T_n$ , соответственно:

$$X = \{\dots, x_m^{[i]}, \dots, x_n^{[j]}, \dots\} \rightarrow X' = \{\dots, x_m^{[j]}, \dots, x_n^{[i]}, \dots\}. \quad (1.25)$$

Здесь  $i, j, m$  и  $n$  связаны функциями перестановки в формуле (1.22), и обмен реплик представляет новую функцию перестановки  $f'$ :

$$\begin{cases} i = f(m) \rightarrow j = f'(m), \\ j = f(n) \rightarrow i = f'(n). \end{cases} \quad (1.26)$$

Более подробно обмен между репликами можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_m^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_m \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_n^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_n \end{cases}, \quad (1.27)$$

где  $p^{[i]}$  и  $p^{[j]}$  будут описаны ниже. Этот процесс эквивалентен обмену пары температур  $T_m$  и  $T_n$  для соответствующих реплик  $i$  и  $j$ . Его можно представить и в следующем виде [99]:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_n^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_n \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_m^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_m \end{cases}. \quad (1.28)$$

В исходном состоянии репличный обменный алгоритм [116, 117], используемый в методе МК учитывал только координаты  $q$  (и функцию потенциальной энергии  $E(q)$ ). Этот алгоритм в молекулярной динамике связан с импульсом  $p$ , который определяется следующим образом [99]:

$$\begin{cases} p^{[i]} \equiv \sqrt{\frac{T_n}{T_m}} p^{[i]} \\ p^{[j]} \equiv \sqrt{\frac{T_m}{T_n}} p^{[j]} \end{cases}. \quad (1.29)$$

Для сходимости к распределению равновесия, для этого обменного процесса, достаточно наложить условие детального баланса на вероятность перехода  $w(X \rightarrow X')$  [99]:

$$W(X)w(X \rightarrow X') = W(X')w(X' \rightarrow X). \quad (1.30)$$

Отсюда следует

$$\frac{w(X \rightarrow X')}{w(X' \rightarrow X)} = \exp(-\Delta), \quad (1.31)$$

где

$$\Delta \equiv (\beta_n - \beta_m)(E(q^{[i]}) - E(q^{[j]})), \quad (1.32)$$

и  $i, j, m$  и  $n$  связаны функциями перестановки (формула (1.22)) перед обменом [99]:

$$\begin{cases} i = f(m) \\ j = f(n) \end{cases}. \quad (1.33)$$

В соответствии со схемой Метрополиса обмен осуществляется следующим образом [101]:

$$w(X \rightarrow X') \equiv w(x_m^{[i]} | x_n^{[j]}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0 \end{cases}, \quad (1.34)$$

где  $w(x_m^{[i]} | x_n^{[j]})$  - обмен между парами реплик.

Тогда репличный обменный алгоритм, представляет собой поочередное выполнение следующих двух шагов [99]:

1. одновременно моделируются несколько реплик с определенными температурами в каноническом ансамбле независимо от количества МК шагов;
2. пара реплик, соответствующие соседним температурам ( $x_m^{[i]}$  и  $x_{m+1}^{[j]}$ ), после выполнения определенного количества МК шагов обменивается с вероятностью  $w(x_m^{[i]} | x_{m+1}^{[j]})$ .

Такой метод моделирования особенно подходит для параллельных компьютеров. Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными

алгоритмами обобщенного ансамбля, таких как мультиканонический алгоритм [99, 120], состоит в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для последних алгоритмов определение вероятности очень утомительно и отнимает много времени.

#### 1.4 Алгоритм Ванга-Ландау

Как и алгоритм Метрополиса [106], алгоритм Ванга-Ландау [21, 100, 101] принадлежит группе МК методов. Данный алгоритм позволяет найти функцию плотности состояний системы, зная которую можно легко рассчитать все остальные характеристики системы. Особенно эффективным алгоритм Ванга-Ландау оказался при моделировании различных наноструктур [121].

Алгоритм Ванга-Ландау основан на получении равномерного распределения по энергиям, совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний  $g(E)$ . Подобрать вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно определить изначально неизвестную плотность состояний  $g(E)$ , зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний  $g(E)$  очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной  $\ln g(E)$  [98,122,123].

Важным обстоятельством является то, что плотность состояний  $g(E)$  не зависит от температуры, следовательно, рассчитав ее однократно, мы можем вычислить значения любых термодинамических параметров системы при любой температуре.

В данной работе алгоритм Ванга-Ландау был использован нами в следующем виде [104,124,125]:

- задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний  $g(E)=1$ , гистограммы распределений по энергиям  $H(E)=0$ , стартовый модификационный фактор  $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$ ;
- многократно совершаются шаги в фазовом пространстве, пока не будет получена относительно плоская гистограмма  $H(E)$  (т.е. пока не будут посещены все возможные энергетические состояния системы примерно одинаковое количество раз). В качестве критерия "плоскости" гистограммы нами принято условие отклонения числа посещений всех возможных (с ненулевой плотностью  $g(E) \neq 1$ ) энергетических состояний не более чем на 10% от среднего значения по системе;
- при этом вероятность перехода из состояния с энергией  $E_1$  в состояние с энергией  $E_2$  определяется по формуле  $p = g(E_1)/g(E_2)$ . Если переход в состояние с энергией  $E_2$  состоялся, то для энергии  $E_2$  проводится модификация плотности состояния  $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$ , и гистограммы  $H(E_2) \rightarrow H(E_2)+1$ , иначе меняются параметры для энергии  $E_1$   $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$ ,  $H(E_1) \rightarrow H(E_1)+1$ ;
- если гистограмма становится "плоской", то гистограмму  $H(E) \rightarrow 0$  обнуляют, уменьшают модификационный фактор  $f \rightarrow \sqrt{f}$  и продолжают снова и снова, пока модификационный фактор  $f \geq f_{\min}$  т.е. пока не будет достигнуто определенное минимальное значение. В качестве минимального значения модификационного фактора нами принято  $f_{\min} = 1.0000000001$ . Новое распределение  $g(E)$  формируется на основе предшествующего. Модификационный фактор  $f$  является одновременно и критерием завершения, и показателем скорости вычисления. Учитывая, что каждый МК-шаг  $g(E)$ , увеличивается в  $f$  раз, путем изменения  $f_{\min}$  фактически варьируется точность изменения  $g(E)$ , за счет изменения

числа полных Ванга-Ландау циклов. Эта закономерность определяет баланс между точностью  $g(E)$  и скоростью работы алгоритма;

- каждый раз при достижении энергетического минимума производится анализ магнитной структуры основного состояния и его запись в графический файл. При этом полученная конфигурации сравнивается с ранее полученными, и только при обнаружении новой уникальной конфигурации производится сохранение в графический файл. Далее эта структура заносится в специальную базу данных для данной модели для дальнейшего сравнения. Данная процедура позволяет избежать дублирования в графических файлах многократно встречающихся состояний с одинаковой магнитной структурой. Таким образом, если основное состояние не вырождено, то в базе данных в конце процесса моделирования оказываются 2 магнитные конфигурации (с учетом симметрии модели Изинга относительно одновременного отражения всех спинов на решетке), в то время как для фрустрированных систем количество таких конфигураций будет бесконечным, при этом для экономии дискового пространства в графических файлах будут сохранены не более 100 конфигураций;
- после расчета плотности состояний системы для любой интересующей нас температуры рассчитываются различные термодинамические параметры, такие как, энтропия, внутренняя энергия, свободная энергия, теплоемкость, намагниченность, восприимчивость и т. д. Некоторые формулы для расчета термодинамических параметров приведены ниже.

Более подробно алгоритм Ванга-Ландау изложен в работах [95, 123,124].

Зная плотность состояний системы можно рассчитать любой интересующий нас термодинамический параметр  $A(T)$  для любой температуры по следующей формуле [121, 124-127]:

$$A(T) = \frac{\sum_E Ag(E)e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E)e^{-E/k_B T}}. \quad (1.35)$$



Например, намагниченность  $m$ , параметр порядка  $mst$ , внутренняя энергия  $U$ , свободная энергия  $F$ , энтропия  $S$  и теплоемкость  $C$  системы могут быть рассчитаны следующим образом:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (1.36)$$

$$\langle m \rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1.37)$$

$$\langle mst \rangle_E = \frac{1}{N} \left( \left| \sum_{i \in A} S_i \right| + \left| \sum_{i \in B} S_i \right| + \left| \sum_{i \in C} S_i \right| \right), \quad (1.38)$$

$$m(T) = \frac{\sum_E \langle m \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle m \rangle_T, \quad (1.39)$$

$$mst(T) = \frac{\sum_E \langle mst \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle mst \rangle_T, \quad (1.40)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left( \sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (1.41)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (1.42)$$

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (1.43)$$

Отметим важную особенность алгоритма Ванга-Ландау: значения любых термодинамических параметров можно определить для любой температуры, с любым шагом, при этом объем необходимых вычислений, в отличие от других классических алгоритмов метода МК, вырастает незначительно.

## 1.5 Модели первого приближения

### Модель Изинга

Модель Изинга является простейшей и самой распространенной моделью в статистической физике для описания ФП в магнитных материалах. Она представляет собой набор дискретно заданных спинов, расположенных на  $d$ -мерной решетке, которые могут находиться в одном из двух состояний (+1 или -1), и соответствуют двум возможным ориентациям спинов (вверх или вниз). Данная модель относится к широкому классу решеточных моделей, в которых рассматриваются локальные взаимодействия. В магнитных системах локальные взаимодействия обусловлены спинами, расположенными в узлах кристаллической решетки. Спины могут представлять собой магнитные моменты атомов в твердом теле, взаимодействующие друг с другом и внешним магнитным полем.

Гамильтониан модели Изинга можно представить в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} S_i S_j - H_0 \sum_i S_i, \quad (1.44)$$

где  $J$  – параметр обменного взаимодействия между спинами,  $H_0$  – внешнее магнитное поле, и  $S_i = \pm 1$  для всех  $i$ .

В 1925 г. Э. Изинг решил одномерную модель Изинга и обнаружил, что в ней отсутствует ФП. В 1944 году Л. Онсагер опубликовал решение для двухмерной модели Изинга на квадратной решетке. Он показал, что точный расчет свободной энергии приводит к существенному отличию поведения термодинамических параметров в окрестности ФП [41]. Следует отметить, что точные решения помогают оценить пригодность приближенных методов, используемых для трехмерных моделей. Кроме того, эти модели могут служить хорошим приближением для некоторых реальных физических систем, ибо существует большой класс магнитных кристаллов, которые могут быть с хорошей степенью точности описаны этой моделью.

Отметим, что для случая трехмерной модели Изинга, до настоящего времени еще не удалось получить точное решение. Поэтому, интерес к вопросу об исследовании ФП методами численного эксперимента достаточно велик.

Методом МК в работе [128] впервые проведено исследование двухмерной модели Изинга с учетом взаимодействий между ближайшими соседями. Расчет энергии и намагниченности данной модели воспроизводит точный результат Онзагера, полученный для энергии в широкой области температур в пределах погрешности 1%, за исключением области критической температуры. Подробное исследование модели Изинга на квадратной и простой кубической решетке было выполнено еще в 70-е годы [128-132].

Если учитывать обменное взаимодействие следующих ближайших соседей, то фазовая диаграмма модели становится богаче и физика ФП усложняется. Поэтому в последующие годы акцент сместился в сторону изучения моделей со сложными типами взаимодействий и на других классах решеток [133]. Модель Изинга в различных размерностях подробно изучена в [44], где получены высокоточные результаты для двух-, трех- и пятимерного случаев. Даны также основные базовые аспекты различных алгоритмов и применения КРС. На основе этих исследований получена обширная информация о модели Изинга. Таким образом, с большой точностью рассчитаны термодинамические величины и КИ для модели Изинга и ее различных вариантов.

### **Модель Гейзенберга**

Модель взаимодействия, известная как модель Гейзенберга, была предложена В. Гейзенбергом и почти одновременно П. Дираком в 1926 году. Из-за своей универсальности, эта модель стала одним из основных объектов исследования в теории магнетизма. Она может быть использована для описания магнитоупорядоченных тел, в которых внутренние магнитные взаимодействия приводят к упорядочению магнитных моментов отдельных ионов, и образец имеет отличный от нуля магнитный момент ниже некоторой критической температуры.

Эта модель в течение многих лет исследуется в различных размерностях разными методами, в том числе и методами МК. Несмотря на все эти усилия, модель Гейзенберга практически не имеет точных решений.

Первые попытки решения одномерной модели Гейзенберга были предприняты Г. Бете в 1931 г. [134]. Гипотеза, сформулированная в этом исследовании, позднее была применена ко многим другим физическим моделям. В 1971 г. Р. Бакстер, усовершенствовав эту гипотезу, решил более общую одномерную модель. Однако решение двухмерной и трехмерной модели Гейзенберга крайне затруднительно.

Гамильтониан модели Гейзенберга с взаимодействием между ближайшими соседями можно представить в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (1.45)$$

где  $J$  – параметр обменного взаимодействия, и  $|\vec{S}_i| = 1$ .

Биндер и другие [135] методом МК изучили суперпарамагнитную частицу с помощью Гейзенберговской модели в конечной решетке со свободными границами и наблюдали некоторый сдвиг критической температуры. Обнаружена также сильная зависимость намагниченности от формы частицы. В работе [136] методами численного эксперимента исследована трехмерная модель Гейзенберга на ограниченной решетке антиферромагнетика (со свободной поверхностью). Также исследованы термодинамические свойства частиц в зависимости от температуры, внешних магнитных полей, формы частицы, числа спинов в ячейке МК. Изучены эффекты, обусловленные наличием свободной поверхности и различия в поведении отдельных спинов вблизи поверхности и внутри частицы.

В работе [46] проведено исследование модели Гейзенберга на простой кубической решетке с размерами  $L \times L \times L$  для  $6 \leq L \leq 24$ . С большой точностью рассчитаны статические КИ  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ ,  $\eta$ , используя КРС и оптимизированный гистограммный метод анализа данных [50, 51]. Аналогичные исследования выполнены и в [73], с использованием кластерного алгоритма на решетке с  $L \leq 48$ .

Выполнен тщательный гистограммный анализ данных и с использованием КРС вычислены КИ  $\nu$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\eta$ . Полученные в этих работах значения КИ находятся в хорошем согласии с данными, полученными методом РГ и  $\varepsilon$ -разложения.

Модель Гейзенберга на  $2d$  квадратной решетке, с обменными взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  может быть использована для описания магнитных структур в реальных материалах. При малых значениях  $J_2$  эта модель может быть использована для описания антиферромагнитных свойств монослоев оксида меди в высокотемпературных оксидных сверхпроводниках на основе Cu [137, 138], а при больших значениях  $J_2$  - антиферромагнитных материалов  $\text{Li}_2\text{VO}_2\text{Si}_2\text{O}_4$  и  $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$  [13, 14]. Более того, наиболее типичными структурами выступают монослои Fe-As в сверхпроводниках  $\text{LaOFeAs}$  [15-18] и  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  [19] на основе Fe. Благодаря своей высокой значимости модель Гейзенберга на квадратной решетке с взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  широко изучалась различными теоретическими и численными методами [139-143]. При низкой температуре Гейзенберговские антиферромагнетики на  $2d$  квадратной решетке проявляют новые типы магнитного порядка и новые квантовые фазы. Ненулевое обменное взаимодействие вторых ближайших соседей вызывает фрустрацию и нарушает антиферромагнитное упорядочение. В работе [143] было обнаружено, что две магнитоупорядоченные фазы – порядок Нееля при  $J_2/J_1 \leq 0.4$  и коллинеарный порядок при  $J_2/J_1 \geq 0.6$  – разделены немагнитной разупорядоченной областью в интервале значений  $0.4 \leq J_2/J_1 \leq 0.6$ , где найдена квантовая спин-жидкостная фаза. При  $J_2/J_1 = 0.4$  обнаружен квантовый ФП второго рода, в то время как  $J_2/J_1 = 0.6$  имеет ФП первого рода, а спиновые разрывы линейно пересекаются при  $J_2/J_1 = 0.5$ .

Большинство исследовательских работ в этой области сосредоточено на двумерных системах, а сведения о трехмерных системах скудны, потому что их труднее стабилизировать. Однако яркими исключениями являются трехмерные фрустрированные системы, такие как антиферромагнитная модель Гейзенберга на объемно-центрированной тетрагональной решетке [144] и на решетке пирохлора [145, 146], где наблюдаются богатые устойчивые спин-жидкие фазы. В частности, геометрически фрустрированная объемно-центрированная тетрагональная

решетка реализуется в нескольких сильно коррелированных электронных материалах и изучается в течение многих лет [147, 148], после выдающегося исследования Вильяна [147]. Стоит отметить, что в последнее время магнитные свойства высокотемпературных сверхпроводников на основе железа описывают трехмерной фрустрированной моделью Гейзенберга с  $J_1$ - $J_2$ - $J_c$  [149-151].

## ГЛАВА II ФРУСТРИРОВАННЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ

### 2.1 Конкуренция обменных взаимодействий, фрустрация

Возникновение фрустрации в системе может быть обусловлено конкуренцией обменного взаимодействия или спецификой геометрии решетки [152-154].

В действительности, главным взаимодействием, приводящим к магнитному упорядочению, является обменное взаимодействие. Несмотря на электростатическое происхождение, обменное взаимодействие не имеет классического аналога. Взаимодействие между магнитными моментами носит чисто квантовомеханический характер. Этот квантовый эффект связан с фермионной природой электронов и запретом Паули. В простейшей модели обменное взаимодействие возникает в системе двух электронов с перекрывающимися координатными волновыми функциями (например, внешние электроны на соседствующих ионах). В зависимости от электронной структуры взаимодействующих атомов (ионов) обменное взаимодействие может быть ферромагнитным или антиферромагнитным. Также различают прямое обменное взаимодействие (непосредственно между парой магнитных атомов) и косвенное обменное взаимодействие (посредством промежуточных атомов или электронов проводимости). Следовательно, обменное взаимодействие сильно зависит от расстояния между взаимодействующими атомами, вида промежуточного иона и геометрии взаимного расположения атомов [155].

Энергия обменного взаимодействия системы магнитных атомов в общем случае может быть записана в виде:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.1)$$

где суммирование ведется по индексам  $i$  и  $j$  — номера взаимодействующих магнитных атомов,  $S_i, S_j$  — их магнитные моменты, как правило, обусловленные наличием у атома отличного от нуля магнитного момента. В такой записи

ферромагнитному взаимодействию атомов  $i$  и  $j$  соответствует  $J_{ij} > 0$ , антиферромагнитному —  $J_{ij} < 0$ .

Самым простым примером является модель Изинга на треугольной решетке (рис. 2.1). Будем считать, что все константы взаимодействия одинаковы по величине, но могут иметь разный знак.

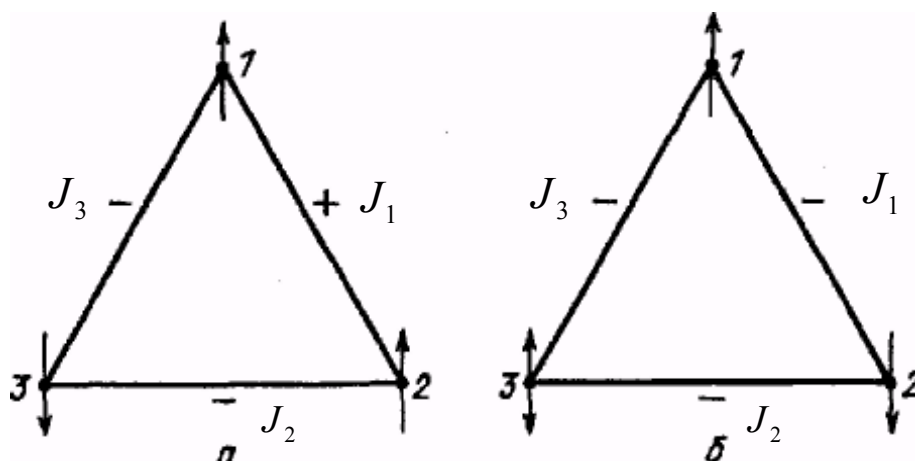


Рис. 2.1. Фрустрации в системе из трех спинов.

Если произведение взаимодействий вдоль треугольника положительно, (т.е. все константы взаимодействия положительны, либо две из них - отрицательны (рис. 2.1 а), то основное состояние такой системы будет единственным. Однако, при антиферромагнитном взаимодействии, произведение взаимодействий вдоль треугольника окажется отрицательным, и основное состояние такой системы будет вырожденным. То есть, если мы зафиксируем первый спин «вверх» и будем выставлять ориентацию спинов в соответствии с заданными взаимодействиями, то ориентация последнего спина окажется неопределенной: энергии состояния «вверх» и состояния «вниз» будут одинаковыми (рис. 2.1 б) [155]. Таким образом, возникает вырождение основного состояния, поскольку система не может одновременно удовлетворять условию минимизации энергии для всех связей в системе. Это принцип действия фрустрации. Он гарантирует, что классическое многообразие основного состояния имеет более высокую симметрию, чем основной гамильтониан.



Явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствии конкурирующих взаимодействий есть фрустрация. Это приводит к вырождению основного состояния системы с ненулевой энтропией при  $T=0$ . Термин происходит от английского слова *frustration* [155]. Существование фрустраций – это всегда ограниченность модели. Они возникают только при специфических численных соотношениях параметров взаимодействия. В физической реальности всегда найдется дополнительное взаимодействие сколь угодно малое по величине, которое уничтожит фрустрацию. В действительности, благодаря своей большой энтропии, доминирующий вклад в термодинамику вносит именно огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния.

Термин фрустрация, в контексте магнитной системы, впервые был введен в 1977 году G. Toulouse [156].

Известно, что беспорядок в системе обусловлен эффектами фрустрации, то есть конкуренцией обменного взаимодействия, которой не удовлетворяет любая конфигурация спинов (энергии спиновой связи в системе не могут быть сведены к минимуму одновременно). Рассмотрим треугольную решетку, с антиферромагнитным типом взаимодействия. Очевидно, что невозможно выстроить ориентацию спинов вдоль треугольника так, чтобы не возникло хотя бы одно «неудовлетворенное» парное взаимодействие спинов. Этот эффект фрустрации может быть выражен функцией [157]:

$$\phi_f = J_1 J_2 J_3 / |J|^3, \quad (2.2)$$

где  $J_i$  – параметр обменного взаимодействия.

В общем виде для любой замкнутой системы ( $J_{ij} = \pm J$ ) [157]:

$$\phi_f = \prod_c J_{ij} / |J| \quad (2.3)$$

где произведение осуществляется по всем связям системы.

Беспорядок, возникающий при  $\phi_f = +1$ , не является существенным. Однако, беспорядок при  $\phi_f = -1$  вызывает особый интерес, так как при этом значении в

системе присутствует фрустрация. Подставив соответствующие значения  $J$ , можно определить  $\phi_f$  для элементарных ячеек решетки (элементарные треугольники на треугольной решетке, элементарные квадраты на квадратной решетке, так называемые плакеты).

В сильно фрустрированной системе конфигурация фрустрированных плакетов представляет собой сложную сеть. Когда рассматривают пару фрустрированных плакетов, из-за фрустраций дополнительную энергию считают пропорциональной длине минимального расстояния между двумя плакетами (струне). Поэтому, основное состояние квадратной решетки определяется путем нахождения набора струн минимальной длины, соединяющих фрустрированные плакеты. Конечно, данное решение проблемы не универсально. Однако, эти соображения дают точную конструкцию различных упорядоченных состояний, по крайней мере, для модели на квадратной решетке с взаимодействиями ближайших соседей. К сожалению, аналитическое решение этой проблемы отсутствует. Поэтому, эту формулировку можно использовать для изучения свойств основного состояния только с помощью численных алгоритмов, которые решают проблему оптимизации длины струны на компьютере [157].

Известно, что для термодинамического поведения системы, далеко не любой беспорядок является существенным или, как принято говорить, релевантным. Релевантной частью беспорядка являются фрустрации, которые существенно меняют поведение системы по сравнению с соответствующей упорядоченной системой. Если беспорядок не влияет на свойства основного состояния, т. е. не создает в системе фрустрации или же устраним некоторым преобразованием спиновых переменных, то он не является существенным. Самый простой пример системы с фиктивным беспорядком является маттисовский магнетик. Фрустрации - это та часть беспорядка, которая неустранима никаким преобразованием переменных [155].

Как известно, при обычном фазовом переходе из парамагнитного состояния в ферромагнитное ниже температуры перехода  $T_c$  происходит спонтанное нарушение симметрии, т.е. система может находиться либо в состоянии, в

котором  $\langle \sigma_i \rangle = +m$ , либо в состоянии  $\langle \sigma_i \rangle = -m$ , где средняя намагниченность  $m$  – это параметр порядка, который обращается в ноль при  $T \rightarrow T_c$ . Между этими двумя «долинами» в пространстве состояний имеется бесконечный барьер свободной энергии, поэтому если ниже  $T_c$  система оказалась в одной из этих «долин», то ни за какое конечное время в другую «долину» она не попадет. В этом смысле любой такой переход можно назвать переходом нарушения эргодичности. При дальнейшем понижении температуры никаких других спонтанных нарушений симметрии в обычном ферромагнетике не происходит [155].

В спиновом стекле существует некоторая  $T_c$ , выше которой система находится в парамагнитном состоянии и эргодичность не нарушена (хотя, в принципе, временные релаксации могут отличаться от обычных парамагнитных). При понижении температуры ниже  $T_c$  происходит ФП нарушения эргодичности, при котором фазовое пространство разделяется не на две, как в ферромагнетике, а на множество «долин», разделенных бесконечными барьерами свободной энергии. Сразу ниже точки перехода, при  $T = T_c - \delta T$  (для простоты описания здесь удобно ввести дискретность температуры), каждая такая долина характеризуется тем, что в каждом узле существуют ненулевые термодинамические средние  $\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)}$ , которые от узла к узлу случайны как по знаку, так и по величине. Здесь  $\langle \dots \rangle_{(\alpha)}$  – обозначает термодинамическое усреднение внутри долины номер  $\alpha$ . При этом физический параметр порядка [155, 158, 159]:

$$q = \frac{1}{N} \sum_i (\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)})^2. \quad (2.4)$$

описывающий степень «замерзания» спинов в каждой из долин, оказывается одинаковым во всех долинах. При  $T \rightarrow T_c$   $q \rightarrow 0$ .

При дальнейшем понижении температуры на  $\delta T$  в каждой из долин происходит новый ФП нарушения эргодичности: каждая долина дробится на много (бесконечно много в макроскопической системе) новых долин, разделенных барьерами свободной энергии (рис. 2.2). При этом состояние системы в каждой из вновь образованных долин описывается соответствующим

параметром порядка (2.4), который при понижении температуры, естественно, увеличивается.



Рис. 2.2. Поведение структуры рельефа свободной энергии при понижении температуры.

Этот процесс дробления фазового пространства продолжается непрерывно вплоть до нулевой температуры. В этом смысле при любой температуре ниже  $T_c$  система находится в точке ФП нарушения эргодичности. Кроме того, при любой температуре ниже  $T_c$  внутри каждой из долин, имеющих при этой температуре, существует бесконечно много метастабильных состояний, разделенных между собой конечными барьерами. Внутри каждой долины имеются барьеры любой высоты, и, таким образом, спектр высот этих барьеров простирается вплоть до бесконечности. Это приводит к тому, за любое конечное время внутри этих долин, строго говоря, настоящего термодинамического равновесие никогда не наступает [155].

Геометрически фрустрированные магнитные системы представляют особый интерес из-за их необычных магнитных и термодинамических свойств. Эти системы в течение нескольких десятилетий были предметом многих теоретических и экспериментальных исследований [160-162]. Для таких систем все спиновые взаимодействия не могут быть одновременно удовлетворены из-за связности решетки, что открывает возможность иметь нетрадиционный магнитный порядок или даже новые спиновые жидкие состояния без какого-либо

дальнего диапазона спинового порядка при низких температурах. Самая ранняя теоретическая модель геометрической фрустрации была представлена Ванье [162] в 1950 г., которая показала, что по сравнению с антиферромагнетиком на двусторонней решетке (квадратная решетка) Изингский антиферромагнетик на треугольной решетке имеет очень различное поведение, существенно отличающееся тем, что нет магнитного порядка до нулевой температуры. С точки зрения реальных материалов существует много примеров [160, 161], в которых магнитные ионы расположены на двухсторонних решетках на основе треугольных единиц, таких как треугольная, кагоме и решетки пирохлора.

Геометрически фрустрированные антиферромагнетики составляют большой класс материалов, в которых фрустрация имеет чисто структурное происхождение и порождает сильно вырожденные основные состояния. В некоторых случаях следствием этого вырождения является то, что система не имеет упорядоченной низкотемпературной фазы, а остается в парамагнитной фазе вплоть до нулевой температуры.

В различных магнитных системах могут проявляться оба типа фрустраций. В последние годы появились новые перспективы для изучения фрустраций в искусственных магнитных системах.

## 2.2 Основные положения теории конечно-размерного скейлинга

Теория КРС, предложенная Фердинандом и Фишером, призвана учесть влияние конечных размеров системы на критические свойства [53, 54, 163-166]. Идеи, заложенные в теории КРС, позволяют экстраполировать МК результаты, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу  $N=L^3 \rightarrow \infty$ , и широко используются [34, 45, 46, 167-169]. Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с периодическими граничными условиями (ПГУ) при температуре  $T$ , близкой к критической температуре  $T_c$  бесконечной системы может быть представлена в виде:

$$F(T, L) \sim L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.5)$$

где  $t = \frac{|T - T_c|}{T_c}$ ,  $T_c = T_c(L = \infty)$  и  $\nu$  – статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ( $L = \infty$ ).

При этом смещение «эффективной температуры перехода» с изменением размеров системы происходит в соответствии с выражением:

$$\frac{k_B T_c(L)}{|J|} = \frac{k_B T_c}{|J|} + aL^{-\gamma}, \quad (2.6)$$

где  $a$  – некоторая константа.

Выражение (2.5) ведет к аналогичным зависимостям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящейся на один спин [28, 41]:

$$C(T, L) \sim L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.7)$$

$$m(T, L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.8)$$

$$\chi(T, L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}). \quad (2.9)$$

Также можно показать, что [41]:

$$m_0(T) \sim (-t)^\beta \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.10)$$

$$m(H, T_c) \sim H^{1/\delta} \quad \text{при } H \rightarrow 0, \quad (2.11)$$

$$\chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.12)$$

$$\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.13)$$

$$\xi(0, T) \sim t^{-\nu} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.14)$$

$$\xi(0, T) \sim (-t)^{-\nu'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.15)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\nu$ ,  $\nu'$  и  $\delta$  – статические критические индексы для системы с  $L = \infty$ , связанные соотношениями скейлинга и гиперскейлинга [28, 41]:

$$\gamma = \gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (2.16)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.17)$$

$$\nu = \nu', \quad (2 - \eta)\nu = \gamma, \quad (2.18)$$

$$\delta = \frac{2 - \alpha + \gamma}{2 - \alpha - \gamma}, \quad (2.19)$$

$$2 - \alpha = d\nu. \quad (2.20)$$

Уравнения (2.7) – (2.9) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечных систем при  $t \ll 1$  и  $L \rightarrow \infty$ .

Справедливость применения теории КРС к простым хорошо известным моделям была показана в целом ряде работ [43]. Насколько хорошо работает теория КРС применительно к моделям с кроссоверами, проверено лишь на весьма ограниченном числе моделей [43, 140, 168-172]. Исследование моделей, в которых возможны несколько кроссоверных переходов кластерными алгоритмами метода МК на основе теории КРС, насколько нам известно, вообще не проводилось.

Обратим внимание еще на один момент. При расчете критических индексов намагниченности  $\beta$  и восприимчивости  $\gamma$  используются следующие выражения:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2.21)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.22)$$

которые получают из (2.8) и (2.9) при  $T = T_c$ . Эти соотношения позволяют легко определить  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$ . В то же время, данные для теплоемкости по этой схеме описать не удастся. Поэтому при определении индекса  $\alpha$  на практике для масштабирования теплоемкости используется следующее выражение [43]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{1/\nu}, \quad (2.23)$$

где  $a$  – некоторый коэффициент.

Выражение (2.6) также малоприспособно для использования на практике из-за невысокой точности определения  $T_c$  на ее основе. Значительно более точным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [44-46]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (2.24)$$

где  $m$  – намагниченность системы с линейными размерами  $L$ . Этот метод позволяет определить  $T_c$  с большой точностью. Ниже, на наших моделях, нами продемонстрирована высокая эффективность этого метода. Отметим, что если в системе происходит ФП 1-го рода, то вместо намагниченности  $m$  в (3.20) фигурирует энергия системы  $E$ :

$$U_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (2.25)$$

Наряду с температурой ФП большую роль при исследовании критических свойств играет и точность определения критического индекса радиуса корреляции  $\nu$ . Однако, его вычисление традиционно сталкивается с серьезной проблемой: определение  $\nu$  с большой точностью весьма затруднительно. Использование кумулянтов Биндера улучшает ситуацию. Биндер показал, что кумулянты имеют максимальный наклон в точке  $T_c$  ФП, и зависимость максимума наклона от линейных размеров системы имеет вид [44, 45]:

$$\left. \frac{dU_L}{d\beta} \right|_{\max} = aL^{1/\nu} (1 + bL^{-\omega}), \quad (2.26)$$

где  $\beta = 1/T$  (обратная температура),  $b$  – некоторая постоянная,  $\omega$  – универсальная постоянная коррекции к скейлингу.



Расположение максимума может служить также в качестве оценки точки ФП. Нами этот метод определения критического индекса радиуса корреляции  $\nu$  использован наряду с другими методами, что позволяет сравнить различные методы между собой и оценить точность определения индекса. В настоящее время на основе теории КРС [34, 111] предложен целый ряд способов определения критического индекса  $\nu$ . Например, производная от логарифма любой степени намагниченности имеет такие же скейлинговые свойства, как и кумулянт  $U_L$ , и может быть представлена в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \langle m^n \rangle = \frac{1}{\langle m^n \rangle} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle m^n \rangle = \left( \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle \right), \quad (2.27)$$

Обобщая все выше сказанное, можно записать:

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (2.28)$$

где  $g_{V_n} = Const$ , а  $V_n$ , к примеру, может принимать следующие значения:

$$V_1 = \frac{\langle mE \rangle}{\langle m \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.29)$$

$$V_2 = \frac{\langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.30)$$

$$V_3 = \frac{\langle m^3 E \rangle}{\langle m^3 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.31)$$

$$V_4 = \frac{\langle m^4 E \rangle}{\langle m^4 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.32)$$

$$V_5 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[ \langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (2.33)$$

$$V_6 = 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.34)$$

$$V_7 = 2[m^2] - [m^4], \quad (2.35)$$

$$V_8 = 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.36)$$

$$V_9 = (4[m] - [m^4])/3, \quad (2.37)$$

$$V_{10} = (3[m] - [m^3])/2, \quad (2.38)$$

$$V_{11} = 2[m] - [m^2]. \quad (2.39)$$

где  $[m^n] = \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}$ ,  $T$  – температура,  $\beta = 1/T$ .

А для определения статических киральных критических индексов восприимчивости  $\gamma_k$ , намагниченности  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu_k$  использованы соотношения теории КРС [34]:

$$m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}, \quad (2.40)$$

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}, \quad (2.41)$$

$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_n}, \quad (2.42)$$

где в качестве  $V_{nk}$  выступает:

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{\langle m_k^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i=1, 2, 3, 4).$$

### 2.3 Гистограммный метод Монте-Карло

Гистограммный метод МК позволяет выполнить одно моделирование методом МК при определенной температуре и экстраполировать результаты на другие близкие температуры. Очевидно, что это может сэкономить больше машинного времени по сравнению с альтернативой выполнения ряда различных моделирований в диапазоне температур для извлечения той же информации. Метод основан на идее, выдвинутой Valleau и Card (1972). Их результаты были вновь открыты и расширены в 1988 году Ферренбергом и Свендсенем [50, 51, 173], который назвал этот метод «одиночным методом гистограммы».

Расчет вероятности значения некоторого оператора  $\Phi$  в системе, контактирующей с тепловой ванной с температурой  $T$ , является стандартной задачей равновесной статистической механики:

$$\langle \Phi \rangle_T = \frac{\sum_i \Phi_i \exp(-E_i / (k_B T))}{\sum_i \exp(-E_i / (k_B T))}. \quad (2.43)$$

Здесь  $E_i$  и  $\Phi_i$  - соответственно энергия и значение  $\Phi$ , связанные  $i$ -й конфигурацией; сумма пробегает всевозможные конфигурации.

Для полноты картины, приведем краткое описание этого метода. Представим модель, где единственным управляющим параметром является температура, и нужно вычислить зависимость поведения некоторой функции  $f$  от энергии  $E$ . При некотором заданном значении  $T$  выполняется моделирование методом МК с использованием любого заданного алгоритма, который генерирует  $Q$  конфигурации с правильной вероятностью, с постоянным значением Больцмана, измеряется  $f(E)$  для каждой конфигурации и, наконец, вычисляется среднее значение  $\langle f(E) \rangle$ . Это среднее значение можно взять напрямую или же произвести предварительное построение нормированной гистограммы  $W_T(E)$  для энергий, найденных при моделировании. Тогда можно записать:

$$\langle f(E) \rangle_T \approx \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q f(E_q) = \sum_E W_T(E) f(E), \quad (2.44)$$

что является приближенным значением уравнения (2.43)  $\Phi = f(E)$ . Также это уравнение может быть записано как плотность состояний  $g(E)$ :

$$\langle f(E) \rangle_T = \frac{\sum_E g(E) f(E) \exp(-E/(k_B T))}{\sum_E g(E) \exp(-E/(k_B T))}. \quad (2.45)$$

При сравнении уравнений (2.44) и (2.45) очевидно, что  $W_T(E)$  пропорциональна  $g(E) \exp(-E/(k_B T))$ , поэтому аппроксимация плотности состояний задается как  $g(E) \approx W_T \exp(-E/(k_B T))$ . Заметим, что  $g(E)$  является свойством самой системы, не зависящим от температуры. С вышеуказанной аппроксимацией плотности состояний результаты моделирования распространяются на другие температуры. Формула (2.45), записанная для другой температуры  $T'$ , имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle f(E) \rangle_{T'} &= \frac{\sum_E g(E) f(E) \exp(-E/(k_B T'))}{\sum_E g(E) \exp(-E/(k_B T'))} \\ &\approx \frac{\sum_E W_T(E) f(E) \exp(E/(k_B T) - E/(k_B T'))}{\sum_E W_T(E) \exp(E/(k_B T) - E/(k_B T'))}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

## 2.4 Фрустрированная модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей

При количественном описании ФП и КЯ в современной физике конденсированного состояния используют различные решеточные модели. С помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удалось точно решить лишь очень ограниченное количество задач. Одной из таких моделей является двумерная модель Изинга с взаимодействиями ближайших соседей. Это модель была тщательно исследована различными методами и в рамках разных подходов [39,174-176]. Однако учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической двумерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз и ФП. Кроме того, учет взаимодействия вторых ближайших соседей может также влиять на

критическое поведение модели, в частности, появляются различные аномалии критических свойств [21].

В этом параграфе рассматриваются результаты исследования антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей в интервале значений  $0.0 \leq k \leq 1.0$ , где  $k = J_2/J_1$  - величина взаимодействия спина  $S_i$  со вторыми ближайшими соседями.

Данная модель описывается следующим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle ii' \rangle} (S_i \cdot S_{i'}), \quad (2.47)$$

где  $S_i = \pm 1$  – изинговский спин. Первый член в формуле (2.47) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей ( $J_1 < 0$ ), а второй – вторых ближайших соседей ( $J_2 < 0$ ). Двумерная модель Изинга на квадратной решетке при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей становится фрустрированной. Фрустрации в этой модели обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Первые ренормгрупповые расчеты и численное моделирование методом МК для двумерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей были проведены в конце 1970-х гг. в работах [177, 178]. Было обнаружено, что для этой модели в системе имеет место ФП второго рода, определена температура ФП и рассчитаны критические индексы.

В работах [81, 175, 179] также показано, что в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей происходит ФП второго рода, и эта модель может обладать «аномальными» критическими индексами. При нулевой температуре модель имеет два упорядоченных состояния: ферромагнитная фаза, в интервале значений  $0.0 \leq k < 0.5$  и суперантиферромагнитная фаза при  $k > 0.5$ . Кроме того, обнаружена зависимость критических индексов от отношения  $k$ .

Данные полученные для  $k > 0.5$  вызывают много дискуссий. Сценарий непрерывного ФП был под вопросом после расчетов с помощью теории среднего

поля, которые показали наличие ФП первого рода [9]. Согласно результатам работ [10-12] для модели Изинга на квадратной решетке с ферромагнитными взаимодействиями ближайших соседей и антиферромагнитными взаимодействиями вторых ближайших соседей в диапазоне значений  $0.5 < k \leq 1.2$  в системе также наблюдается ФП первого рода.

Результаты исследований, полученные в работах [83, 86] показывают, что в области значений  $0.5 < k < 0.67$  в системе происходит ФП первого рода, а в интервале  $0.67 \leq k \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода с псевдоуниверсальным критическим поведением.

Как видно из вышесказанного, до сих пор остается спорным вопрос, касающийся рода ФП и критического поведения рассматриваемой модели.

В связи с этим, существует острая необходимость исследования ФП и КЯ в данной модели и прояснить картину происходящих процессов. Нами в данном параграфе представлены результаты исследований ФП и КЯ антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

При исследовании нами использован алгоритм Ванга-Ландау [100] и высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло в следующем виде:

1. одновременно моделируются две реплики  $X$  и  $X'$  с разными температурами  $T$  и  $T'$ ;
2. после выполнения 100 МК-шагов на спин эти реплики обмениваются данными в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью:

$$w(X \rightarrow X') = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0, \end{cases}$$

где  $\Delta = (U - U') \cdot (1/T - 1/T')$ ,  $U$  и  $U'$  - внутренняя энергия первой и второй реплики соответственно.

Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности отнимает

много времени. Данный метод нами был апробирован для исследования других более простых моделей [180]. Кроме того, репличный обменный алгоритм облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией.

Расчеты проводились для систем с ПГУ и с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 20 \div 150$ . Соотношение обменного взаимодействия вторых и ближайших соседей менялось в интервале  $0.0 \leq k < 1$  с шагом  $\Delta k = 0.1$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0 = 2.5 \times 10^5$  МК шагов на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до  $\tau = 1.5 \times 10^6$  МК шагов на спин. На всех графиках  $J = J_1$ .

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались выражения [181]:

$$C = (NK^2) \left( \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (2.48)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK) \left( \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), & T < T_N \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (2.49)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N$  – число частиц,  $U$  – внутренняя энергия,  $m$  – параметр порядка,  $T$  – температура (здесь и далее температура дана в единицах  $|J_1|/k_B$ ). Формулы (2.48) и (2.49) получены из флуктуационно-диссипационной теоремы для системы конечных размеров. В пределе при  $N \rightarrow \infty$  выражения дают значения, которые характерны для макросистем.

Параметр порядка системы  $m$  в диапазоне значений  $0.0 \leq k < 0.5$  был рассчитан с помощью выражения [81]:

$$m = [m_1 + m_3 - (m_2 + m_4)] / 4 \quad (2.50)$$

где  $m_1, m_2, m_3, m_4$  – параметр порядка по подрешеткам.

Параметр порядка  $m$  в интервале значений  $0.5 < k \leq 1.0$  вычислен с помощью следующих выражений [80]:

$$m_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} S_i, \quad \lambda = 1, 2, 3, 4, \quad (2.51)$$

$$m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)] / 4 \quad (2.52)$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)] / 4 \quad (2.53)$$

$$m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2} \quad (2.54)$$

На рисунках 2.3 и 2.4 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости, полученные при  $L = 80$  для различных значений  $k$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Отметим, что в интервале  $0.1 \leq k \leq 0.4$  увеличение значения  $k$  сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов восприимчивости. Это обусловлено усилением конкурирующих взаимодействий вторых ближайших соседей, вследствие чего система становится более восприимчивой.

На рисунках 2.5 и 2.6 приведены графики зависимости теплоемкости и восприимчивости от температуры в интервале  $0.6 \leq k \leq 1.0$ . Отметим, что на всех графиках теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  от температуры для всех значений  $k$  вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы. В данном случае имеем противоположную картину. Уличение значения  $k$  сопровождается сдвигом максимумов в сторону более высоких температур. Физическую картину происходящего можно объяснить тем, что увеличение взаимодействия вторых ближайших соседей увеличивает вклад энергии взаимодействия по модулю, система становится более жесткой, что соответственно повышает температуру ФП. Рост абсолютных значений максимумов происходит за счет конкуренции первых и вторых ближайших соседей.



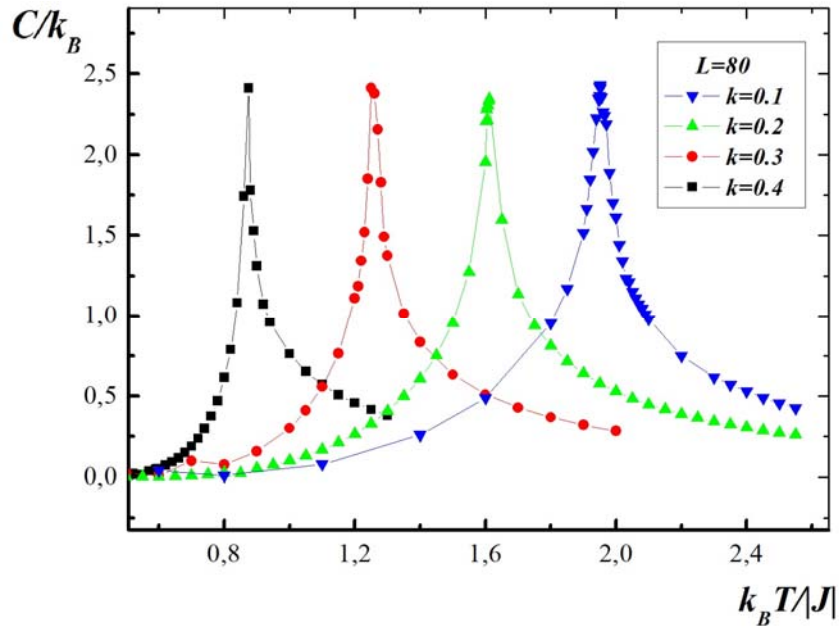


Рис. 2.3. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L = 80$  для разных  $k$ .

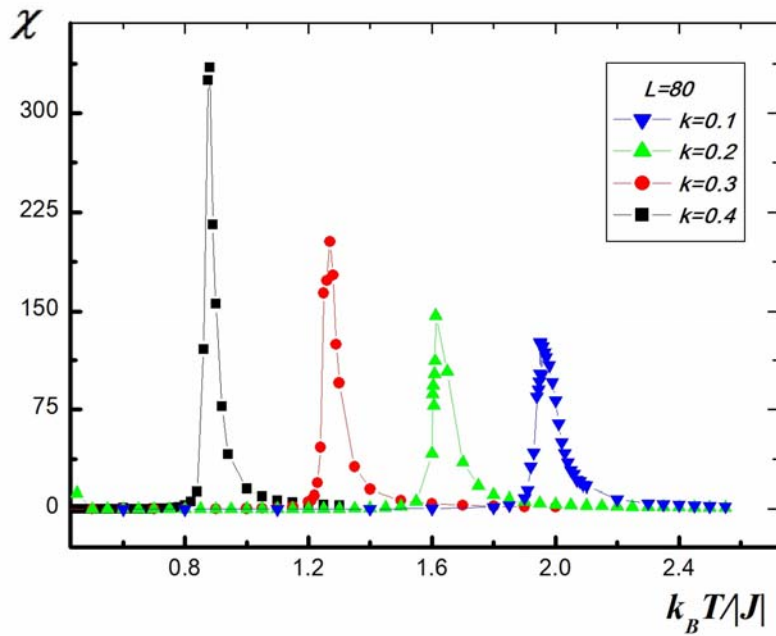


Рис. 2.4. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L = 80$  для разных  $k$ .

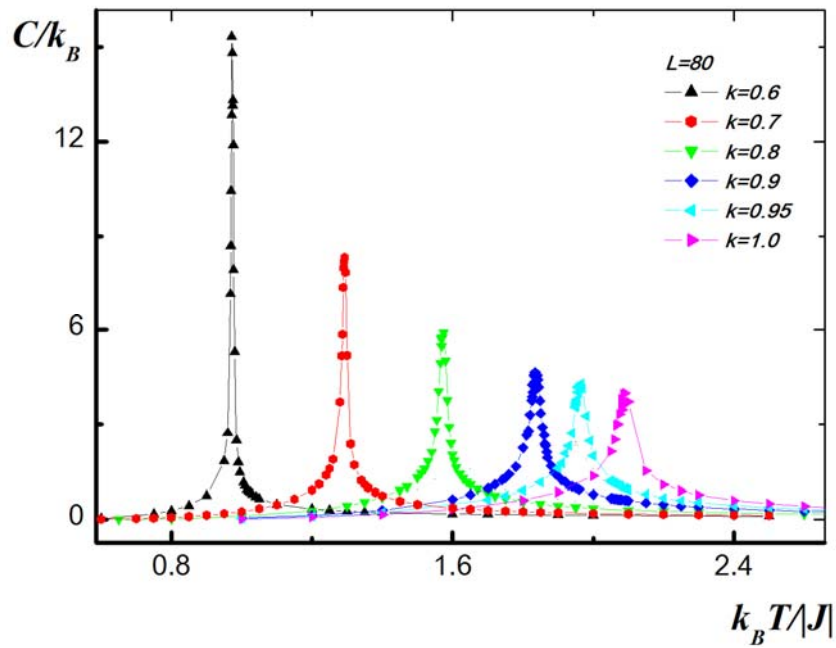


Рис. 2.5. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/J$  для системы с  $L = 80$  для разных  $k$ .

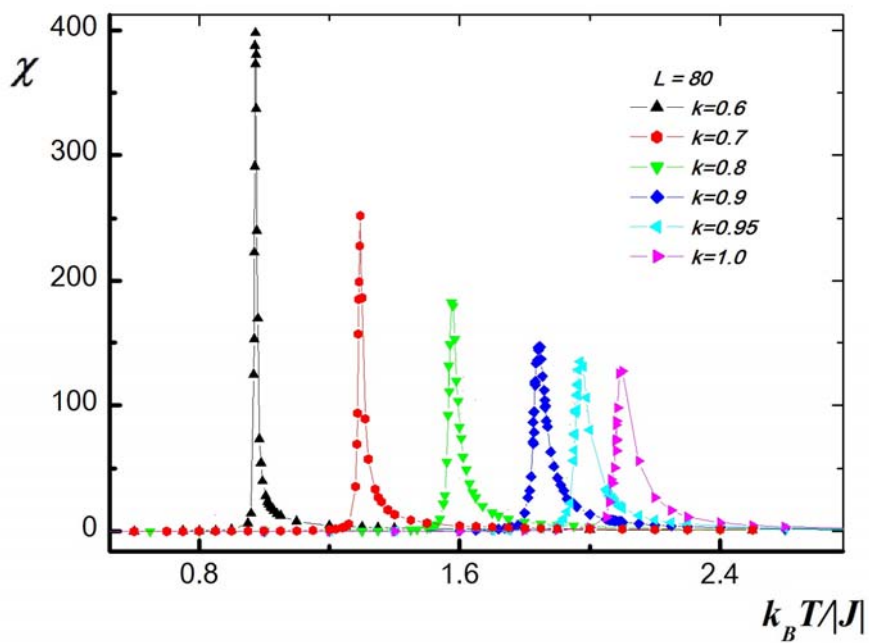


Рис. 2.6. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/J$  для системы с  $L = 80$  для разных  $k$ .

Для определения критической температуры  $T_N$ , нами применен метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка [44, 182, 183]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (2.55)$$

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}. \quad (2.56)$$

где  $U_L$  – кумулянт по намагниченности,  $V_L$  – кумулянт по энергии.

Известно, что ФП первого рода характеризуются тем, что величина  $V_L$  стремится к некоторому нетривиальному значению  $V^*$  согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d}. \quad (2.57)$$

при  $L \rightarrow \infty$  и  $T = T_N(L)$ , где величина  $V^*$  отлична от  $2/3$ , а минимальная величина  $U_{Lmin}(T = T_{min})$  расходуется  $U_{Lmin}(T = T_{min}) \rightarrow -\infty$  при  $L \rightarrow \infty$ .

Выражения (2.55) и (2.56) позволяют определить критическую температуру  $T_N$  с хорошей точностью. Согласно теории конечно-размерного скейлинга точка пересечения всех кривых  $U_L(T)$  является критической точкой [181]. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  имеют четко выраженную точку пересечения [182].

На рисунках 2.7 и 2.8 представлены характерные зависимости  $U_L$  от температуры при  $k=0.2$  и  $k=0.7$  для разных значений  $L$ . Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. На вставках видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ( $k=0.2 - T_N = 1.609$ ;  $k=0.7 - T_N = 1.289$ ), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений  $k$ .

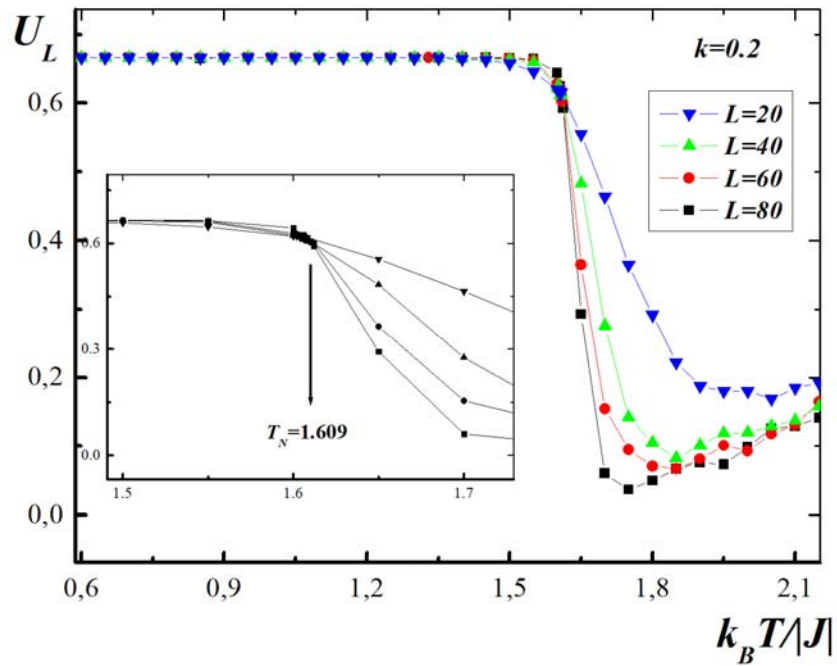


Рис. 2.7. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k = 0.2$ .

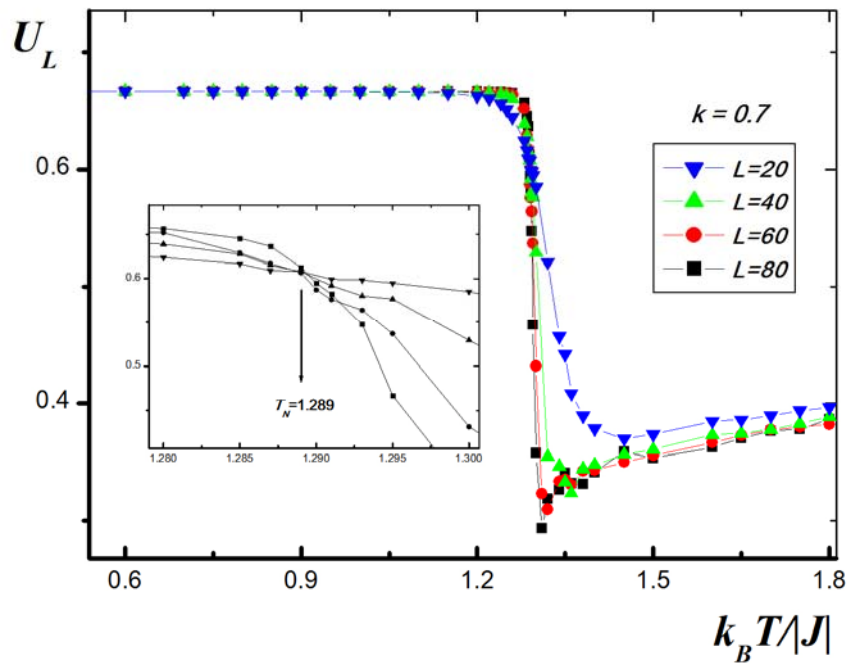


Рис. 2.8. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k = 0.7$ .

В отличие от работ [9-12, 178-179, 84, 86], здесь представлены значения энтропии  $S$  при более низких, а также при более высоких температурах, которые облегчают установление существования фрустрации в исследуемой системе. Алгоритм Ванга-Ландау представляет собой реализацию метода энтропийного моделирования и позволяет вычислять функцию плотности состояний системы. На рисунке 2.9 показаны плотности состояний  $g(E)$  для систем с различными линейными размерами  $L$ . Видно, что при увеличении линейных размеров системы плотности состояний в разных энергетических диапазонах изменяются по-разному. Во-первых, плотность состояний  $E = E_{\max} = 3N$  не зависит от линейных размеров (существуют только два состояния, имеющие такую энергию для систем любых размеров). Плотность состояний  $g(E)$  при минимальной энергии  $E = E_0$  увеличивается умеренно с ростом линейных размеров, а в интервале энергий  $E_{\min} + \delta E < E < E_{\max}$ , плотность состояний  $g(E)$  сильно возрастает с ростом линейных размеров. Также мы обнаружили, что достаточно узкий энергетический интервал представляет собой процентные доли энергии основного состояния, в котором умеренный рост  $g(E)$  изменяется на сильный рост. Анализ этого интервала не представлен, мы просто указываем, что данный интервал становится очень узким с ростом линейных размеров, и в среднем  $\delta E \approx E_{\min} \times 10^{-3}$  для изученных систем.

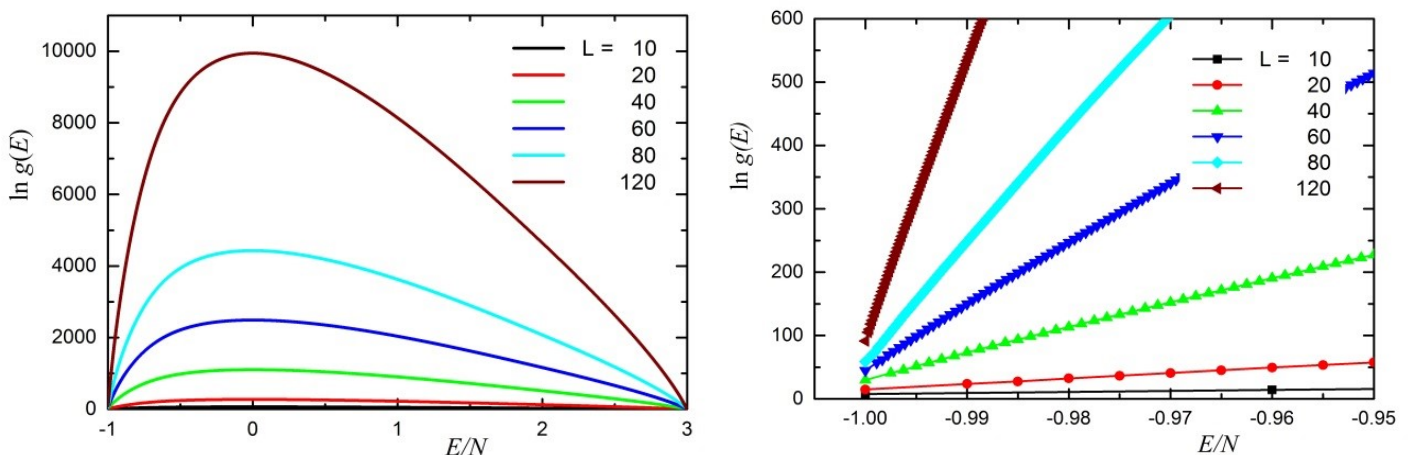


Рис. 2.9. Плотность состояний  $g(E)$  для систем с разными линейными размерами  $L$  при  $k = 0.5$ .

Согласно теоретическим данным при  $k=0.5$  взаимодействия первых и вторых ближайших соседей одинаковые, и в системе возникает фрустрация. Это нарушает порядок в системе и приводит к исчезновению ФП.

Чтобы проверить наличие фрустрации, мы анализировали температурную зависимость энтропии системы  $S$ . Известно, что энтропия в фрустрированной модели Изинга должна принимать ненулевые значения при низких температурах и стремиться к  $\ln 2$  при более высоких температурах [184]. Эти особенности показаны на рисунке 2.10.

Как видно из рисунка 2.10, энтропия  $S/L$  при  $T \rightarrow 0$  ( $T$  - приведенная температура) не меняется с линейными размерами системы и стремится к ненулевому значению. Это более наглядно продемонстрировано на рисунке 2.11, где показано, что при  $L \rightarrow \infty$  энтропия  $S_0/L \rightarrow 0.69(2)$ . Такое поведение энтропии объясняется тем, что логарифм плотности состояний  $\ln g(E)$  возрастает пропорционально  $L$  в основном состоянии ( $E/N = -1$ ) с увеличением линейных размеров системы. Это связано с тем, что фрустрации в системе приводят к вырождению основного состояния, но степень вырождения меньше, чем для моделей с ненулевой энтропией основного состояния. Об этом мы также можем судить по рисункам 2.12 и 2.13, на которых представлены зависимости теплоемкости и энергии от температуры, полученные при  $k=0.5$  для разных значений  $L$ . Как очевидно, увеличение линейных размеров решетки вызывает расщепление теплоемкости. На диаграммах теплоемкости имеются два пика (гладкий и острый) при  $L \geq 40$ . При увеличении  $L$  острый пик смещается в сторону более низких температур. Этот пик становится узким с ростом  $L$  и падает на довольно узкий температурный интервал. Об этом свидетельствует скачок кривой зависимости энергии  $E/N$  от температуры  $T$  на рисунке 2.13. С увеличением линейных размеров системы кривая зависимости становится более резкой, но уменьшается по высоте. Все это приводит к тому, что "скачок" исчезает в термодинамическом пределе, как показано на графике энергии. Пунктирная линия

получена из подробного анализа температурной зависимости энергии для системы с различными линейными размерами [172].

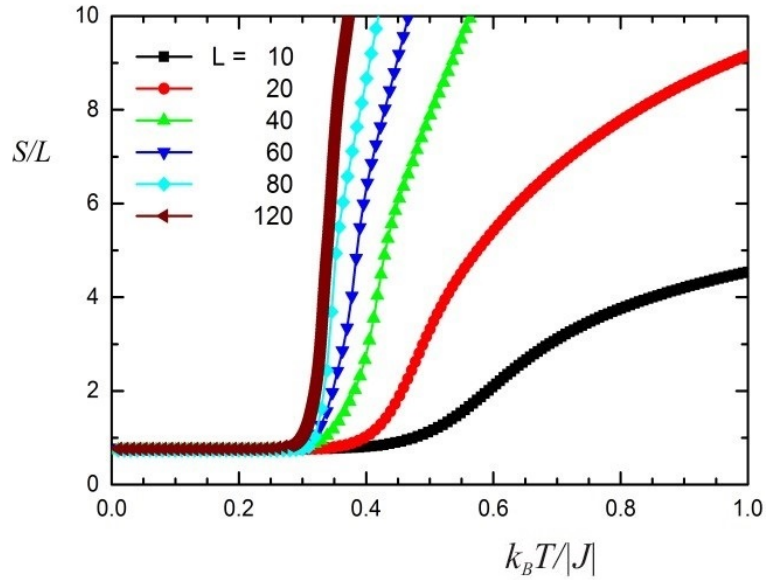


Рис. 2.10. Температурная зависимость энтропии  $S/L$  для систем с разными линейными размерами  $L$  при  $k = 0.5$ .

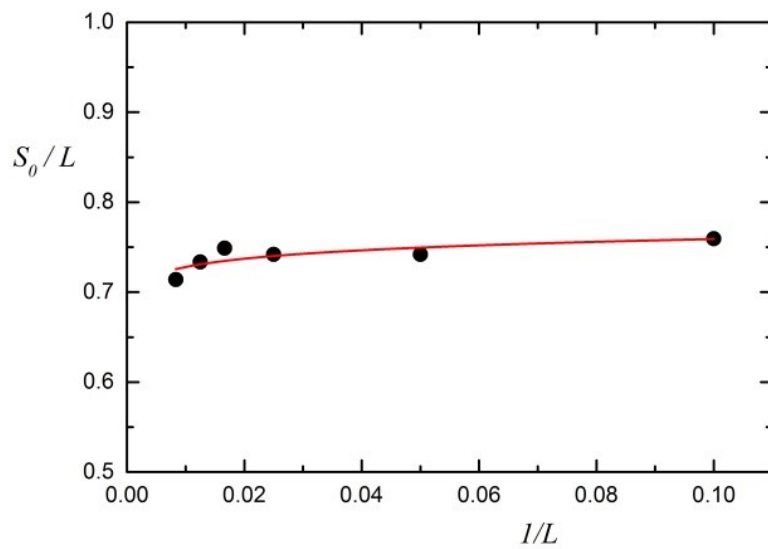


Рис. 2.11. Зависимость основного состояния энтропии  $S_0/L$  от линейных размеров  $L$  при  $k = 0.5$ .

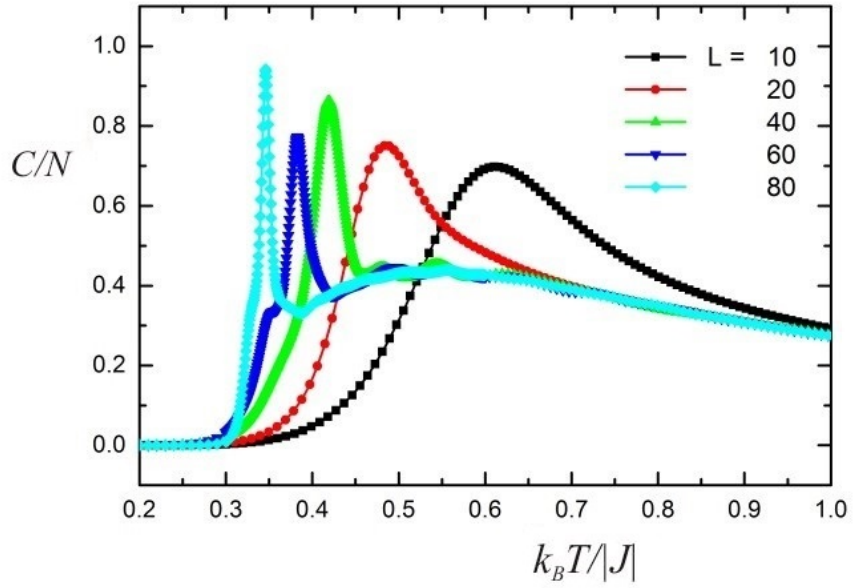


Рис. 2.12. Зависимость теплоемкости  $C/N$  от температуры для разных линейных размеров  $L$  при  $k = 0.5$ .

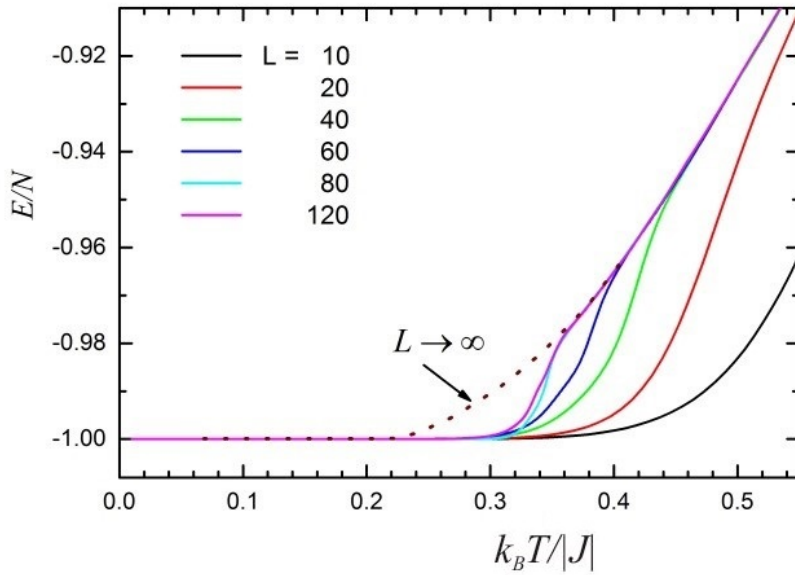


Рис. 2.13. Зависимость энергии  $E/N$  от температуры для разных линейных размеров  $L$  при  $k = 0.5$ .



Зависимости теплоемкости и энергии от температуры, полученные при  $L=40$  для разных значений  $k$ , приведены на рисунках 2.14 и 2.15. На рисунке 2.14 изображено расщепление теплоемкости в интервале  $0.45 \leq k \leq 0.5$ . Гладкий максимум обращается в нуль при  $k=0.51$  и остается только острый максимум, значение которого равно  $C/N=4.0$ . При этом значении  $k$  система подвергается ФП первого порядка, что подтверждается более резкой зависимостью энергии на рисунке 2.15, возникающей в точке ФП при  $k=0.51$ , тогда как в интервале  $0.45 \leq k < 0.5$  реализуется ФП второго рода.

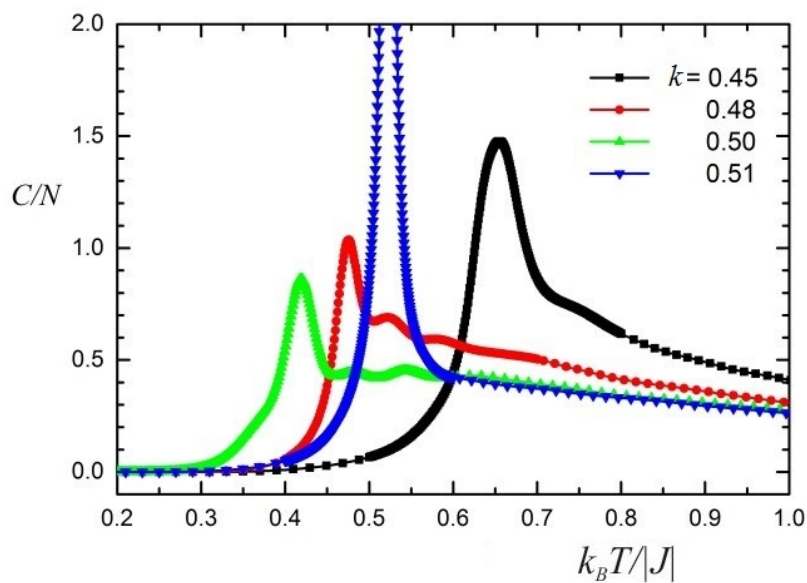


Рис. 2.14. Зависимость теплоемкости  $C/N$  от температуры для разных  $k$  при  $L = 40$ .

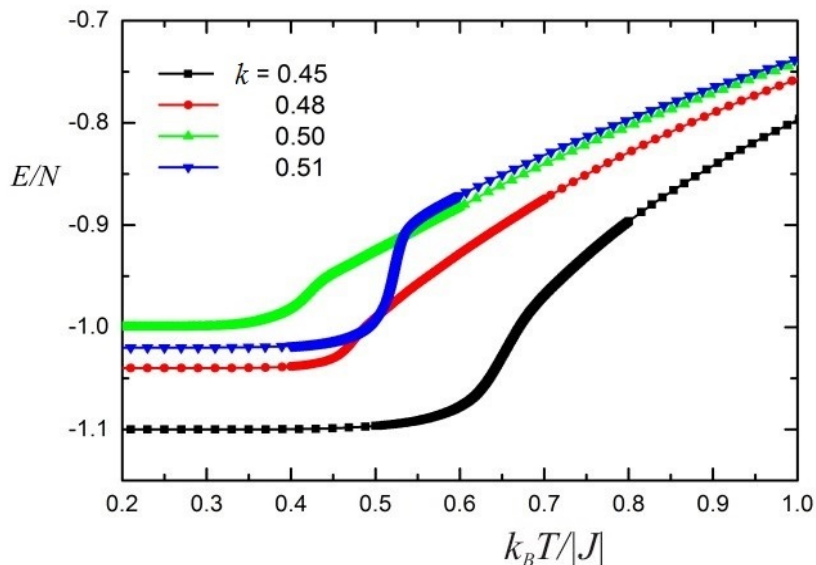


Рис. 2.15. Зависимость энергии  $E/N$  от температуры для разных  $k$  при  $L = 40$ .

Согласно данным работы [87], максимальное значение теплоемкости  $T_{C_{\max}}$  стремится к нулевой температуре в термодинамическом пределе  $L \rightarrow \infty$ , а ФП при конечной температуре отсутствует. На рисунке 2.16 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме мы видим, что в точке  $k=0.5$  пересекаются три различные фазы: I – антиферромагнитная, II – парамагнитная и III – суперантиферромагнитная. Согласно нашим данным, на диаграмме видно, что  $T_{C_{\max}}$  при  $L \rightarrow \infty$  стремится к конечной величине  $T_{C_{\max}}(L = \infty) \approx 0.23(5)$  для  $k=0.5$ .

Такая же модель была исследована в работе [78]. Авторы построили фазовую диаграмму зависимости температуры ФП  $T_N$  от соотношения обменных параметров  $k$ . Они обнаружили, что в интервале значений  $k < 0.5$  и  $k \geq 0.948$  происходит ФП второго рода, а в интервале  $0.5 < k < 0.948$  наблюдается переход первого рода. Результаты наших исследований показывают, что в области  $k < 0.5$  и  $k \geq 0.67$  наблюдается переход второго рода, а в интервале значений  $0.5 < k < 0.67$  – ФП первого рода. Этот факт подтверждается и гистограммным анализом данных. Наши данные по интервалам, в которых наблюдается ФП первого и второго рода в этой модели согласуются с результатами работ [83, 84, 86].

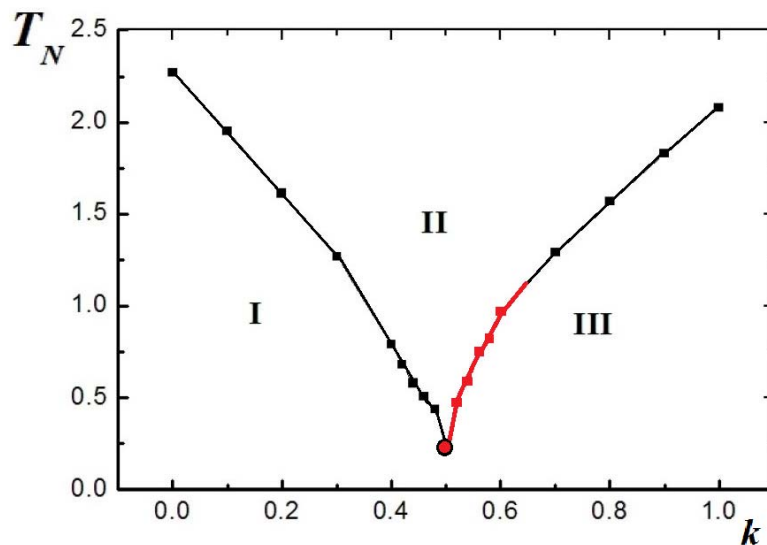


Рис. 2.16. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей

Гистограммный анализ данных позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом МК на основе расчета кумулянтов Биндера, но и определить ряд других важных параметров [100].

Гистограммный метод использует случайное блуждание в энергетическом пространстве и позволяет получить достоверные значения для плотности состояний энергии  $g(U)$ . Вероятность перехода из одного состояния в другое определяется формулой:

$$P(U \rightarrow U') = \min [g(U)/g(U'), 1] \quad (2.58)$$

где  $U$  и  $U'$  – энергии до и после переворота спина.

На рисунках 2.17 и 2.18 приведены гистограммы распределения энергии для случая  $k=0.2$  и  $k=0.7$ . Графики построены в критической точке для размеров решетки  $L=150$ . На рисунках мы наблюдаем один пик, что характерно для ФП второго рода [100]. Аналогичные гистограммы были построены и для остальных значений  $k$ . На рисунке 2.19 представлена гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.51$  в критической точке для системы с  $L=150$ . Как видно, эта модель демонстрирует бимодальное распределение энергии, типичное для первого порядка. Такое поведение проявляется в диапазоне  $0.5 < k < 0.67$ . Аналогичные результаты были получены для этой же модели в работах [83, 84, 86].

Из полученных результатов следует, что в интервалах значений  $0.0 \leq k < 0.5$  и  $0.67 \leq k \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода. В диапазоне значений  $0.5 < k < 0.67$  реализуется ФП первого рода. Установлено, что точка  $k=0.5$  является точкой с достаточно сильно фрустрированным состоянием. Однако, по нашим данным в этой точке полностью фрустрированное состояние не возникает.

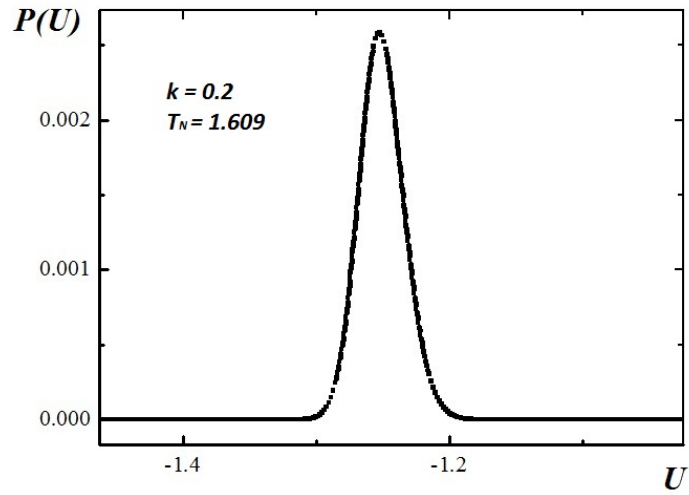


Рис. 2.17. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.2$  при  $L=150$ .

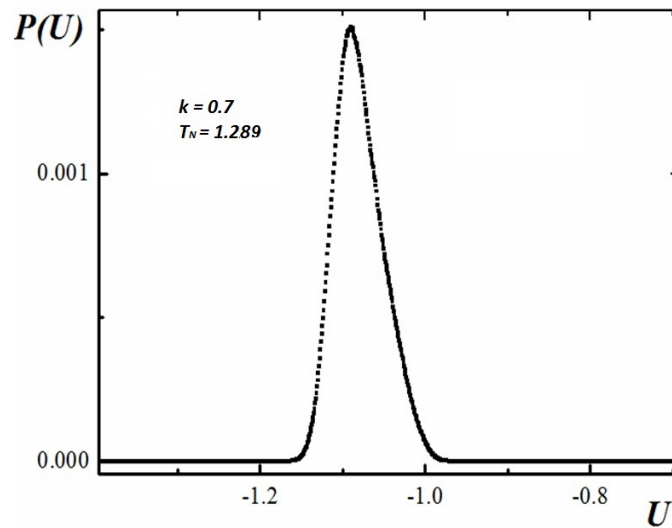


Рис 2.18. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.7$  при  $L=150$ .

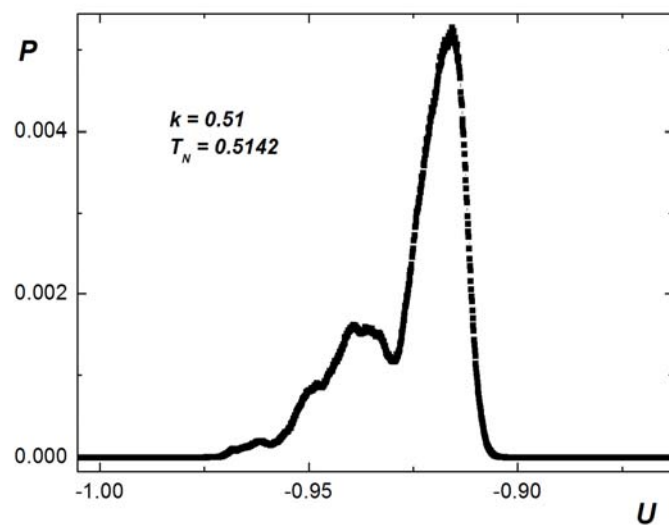


Рис 2.19. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.51$  при  $L=150$ .

Для расчета статических КИ теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\chi$ , намагниченности  $\beta$  и радиуса корреляции  $\nu$  применены соотношения теории КРС. Из теории КРС следует, что в системе с размерами  $L \times L$  при  $T=T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие выражения (2.21), (2.22), (2.28) [46, 53, 54].

В уравнении (2.28)  $g_{V_n}$ -постоянная, а в качестве  $V_n$  могут выступать:

$$V_n = \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad (n=1,2,3,4). \quad (2.59)$$

Эти выражения были нами использованы для определения  $\beta$ ,  $\chi$  и  $\nu$ .

Для расчета критического индекса теплоемкости  $\alpha$ , как правило, используется выражение [205]:

$$C_{\max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \quad (2.60)$$

где  $A_1$  и  $A_2$  – некоторые коэффициенты.

Нами вычислены критические параметры только в интервалах  $0.0 \leq k < 0.5$  и  $0.67 \leq k < 1.0$ , где наблюдается ФП второго рода.

На рисунках 2.20 и 2.21 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров  $V_n$  при  $n=1, 2, 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $k=0.3$  и  $k=0.9$ . Как видно из рисунков все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Зависимости на рисунке, построенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Угол наклона прямой определяет значения  $1/\nu$ . Вычисленное таким образом значение  $\nu$  использовалось для определения критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\chi$  и параметра порядка  $\beta$ .

На рисунках 2.22, 2.23, 2.24 и 2.25 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка  $m$  и восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $k=0.3$  и  $k=0.9$ . Из этих рисунков видно, что все точки в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения  $\beta/\nu$  и  $\chi/\nu$ . По этой схеме были

определены значения и для теплоемкости  $\alpha/\nu$ . Имея данные по  $\nu$ , вычислены статические критические индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ .

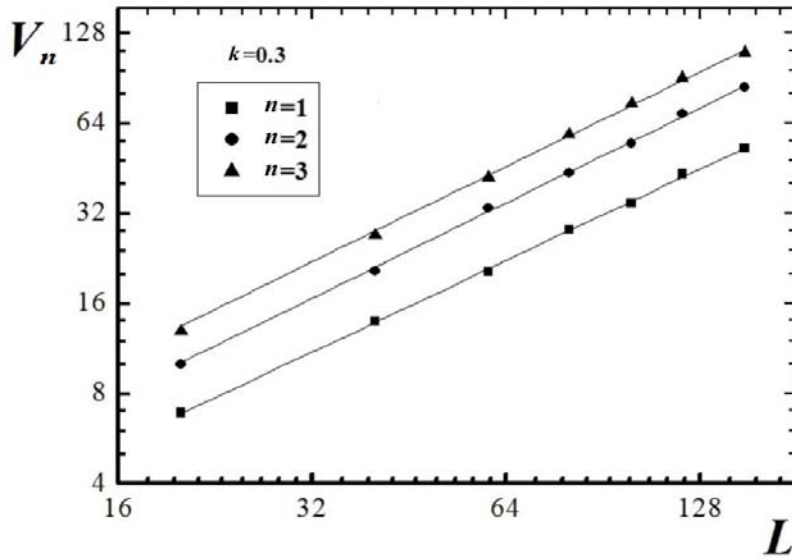


Рис. 2.20. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .

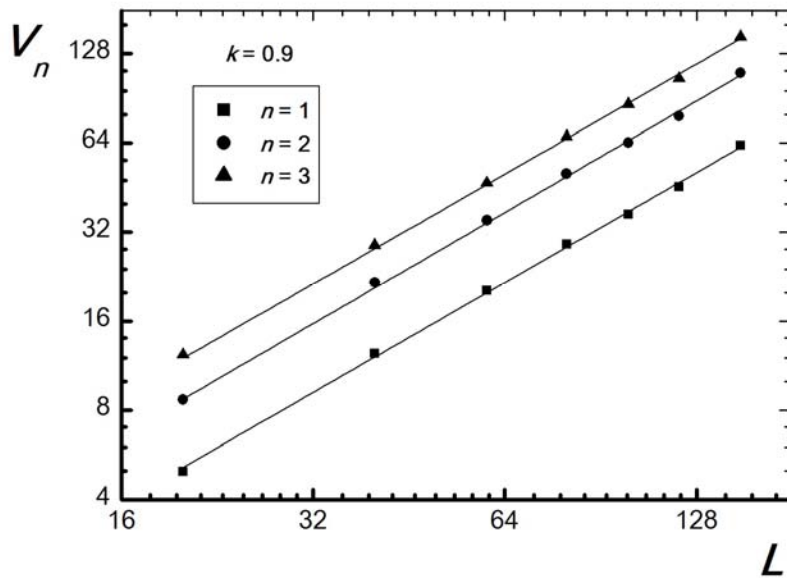


Рис. 2.21. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .

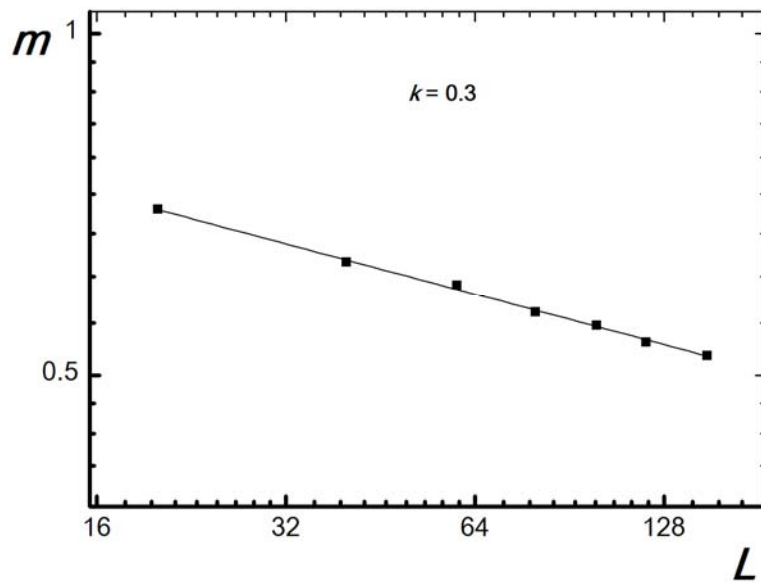


Рис. 2.22. Зависимость параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .

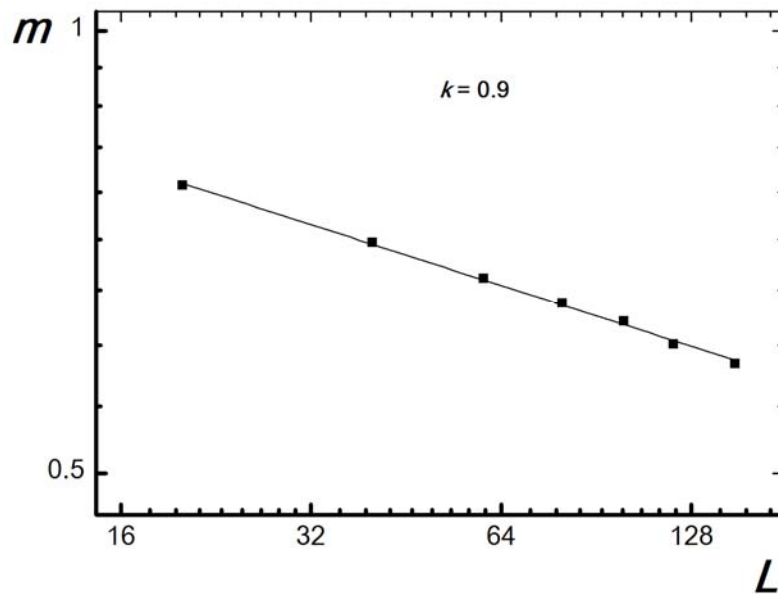


Рис. 2.23. Зависимость параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .

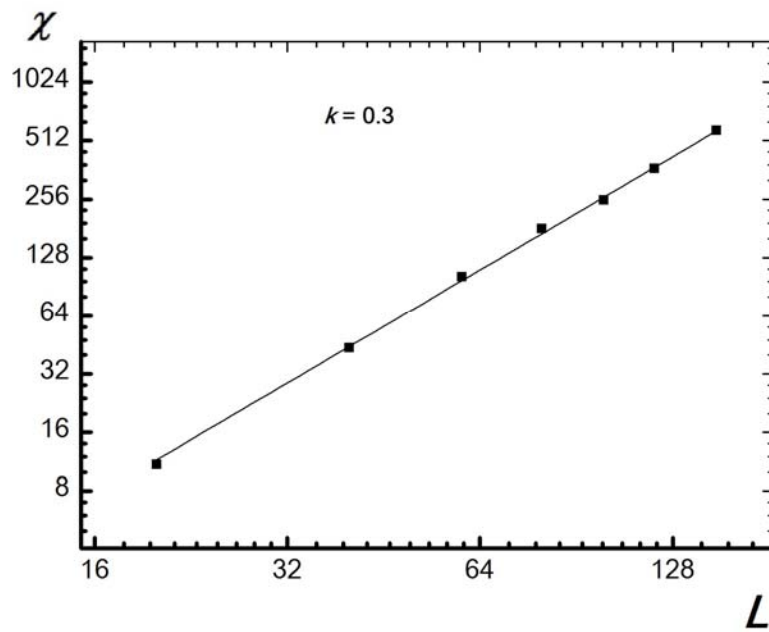


Рис. 2.24. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .

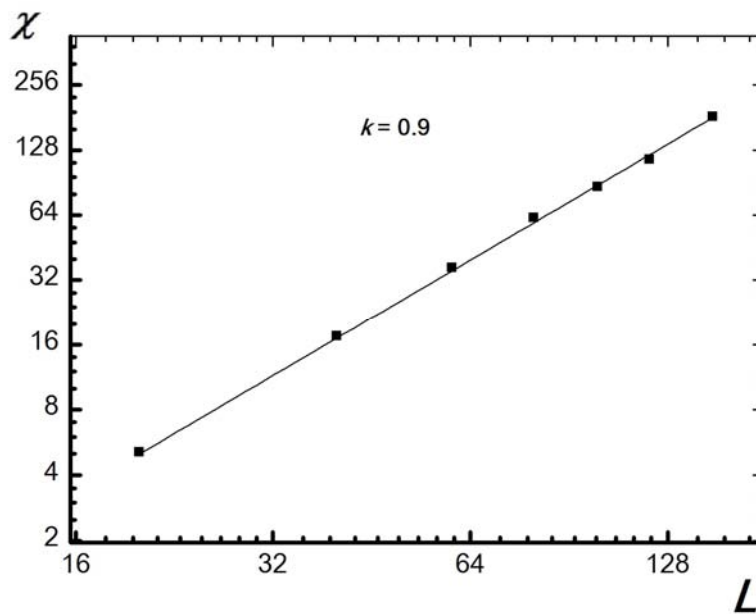


Рис. 2.25. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .



Эта процедура использована для расчета КИ при значениях  $k=1; 0.95; 0.9; 0.8; 0.7; 0.4; 0.3; 0.2, 0.1$  и  $0$ . Все значения статических КИ, полученные таким образом, представлены в таблице 1.

Особо следует отметить процедуру, использованную нами для определения индекса Фишера  $\eta$ . Используя соотношение между восприимчивостью  $\chi$  и радиусом корреляции  $\xi$  [73]

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}, \quad (2.61)$$

а также соотношение  $\eta = 2 - \gamma/\nu$ , связывающего индекс  $\eta$  и  $\nu$ , нами получено

$$\ln(\chi/\xi^2) = c - \eta \ln \xi, \quad (2.62)$$

где  $c$  - некоторая константа. Для систем с конечными размерами  $\xi = L$ . Тогда при  $T=T_N$  имеем

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L. \quad (2.63)$$

На основе выражения (2.63) было определено значение индекса Фишера  $\eta$ . Эти данные также представлены в таблице 1.

**Таблица 1.** Значения критических индексов для двухмерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке.

$k$	$k_B T_N /  J_1 $	$\nu$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\eta$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
<b>0.0</b>	2.268	1	0.01	0.13	1.75	0.25	2.02
<b>0.1</b>	1.952	1.01	0.01	0.12	1.76	0.26	2.01
<b>0.2</b>	1.612	0.99	0.01	0.11	1.76	0.23	1.99
<b>0.3</b>	1.258	0.99	0.01	0.12	1.76	0.23	2.01
<b>0.4</b>	0.873	1.01	0.01	0.11	1.75	0.25	1.98
<b>0.7</b>	1.289	0.74	0.51	0.10	1.28	0.26	1.99
<b>0.8</b>	1.567	0.78	0.46	0.10	1.37	0.24	2.03
<b>0.9</b>	1.828	0.80	0.41	0.09	1.43	0.22	2.02
<b>0.95</b>	1.955	0.82	0.36	0.09	1.44	0.24	1.98
<b>1.0</b>	2.081(1)	0.830(1)	0.358(1)	0.093(1)	1.451(1)	0.224(1)	1.98
<b>Onsager</b> [28]	2.262	1	0	0.125	1.75	-	2

Как видно из таблицы 1, критическая температура  $k_B T_N / |J_I|$  уменьшается с увеличением величины взаимодействия вторых соседей вплоть до значения  $k=0.4$ . При дальнейшем увеличении  $k$  критическая температура начинает расти. Численные значения критических индексов, приведенные в таблице 1, свидетельствуют, что в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.4$  все индексы совпадают с данными Онзагера, и не зависят от величины  $k$ . В этом интервале наблюдается универсальное критическое поведение. В интервале  $0.7 \leq k \leq 1.0$  все критические индексы меняются с изменением  $k$ , кроме  $\beta$ . Значения критических индексов в этом интервале изменения  $k$  не совпадают с соответствующими значениями из интервала  $0.0 \leq k \leq 0.4$  и не совпадают с данными, полученными для точно решенной модели.

Следовательно, мы можем сделать вывод, что класс универсальности критического поведения модели Изинга с антиферромагнитными взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей сохраняется в пределах значения  $0.0 \leq k \leq 0.4$ . Из таблицы 1 видно, что в исследуемой модели существуют две области, которые характеризуются различным набором критических индексов. Можно утверждать, что изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к неуниверсальному критическому поведению в интервале  $0.7 \leq k \leq 1.0$ .

Сравнение численных значений критических индексов, полученных нами в данной работе с литературными данными показывает хорошее соответствие, причем многие критические параметры для данной модели для различных значений  $k$  рассчитаны нами впервые [79, 80, 83].

Критические индексы теплоемкости  $\alpha=0.342(5)$ , параметра порядка  $\beta=0.103(3)$ , восприимчивости  $\gamma=1.451(7)$  и радиуса корреляции  $\nu=0.84(1)$ , полученные в работах [79, 80] в пределах погрешности совпадают с данными нашей работы при  $k=1$ . Отметим, что для наших данных достаточно хорошо выполняются и скейлинговые соотношения. Это свидетельствует о том, что они определены с хорошей точностью.

## **ГЛАВА III МОДЕЛИ ИЗИНГА И ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ОЦК РЕШЕТКЕ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ПЕРВЫХ И ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ**

### **3.1 Критическое поведение антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей**

Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга приводит к вырождению основного состояния, появлению различных фаз, ФП и аномалий критических свойств [20]. Поэтому в данной работе нами исследованы характер и особенности ФП и КЯ в  $3d$  антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическими свойствами фрустрированных спиновых систем.

В данной работе, нами предпринята попытка на основе специального репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода МК [101, 104] изучить особенности ФП и определить значения критических параметров трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) \quad (3.1)$$

где  $S_{i,j,l} = \pm 1$  – изинговский спин. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие первых соседей величиной  $J_1 < 0$ , а второй – вторых ближайших соседей  $J_2 < 0$ ;  $k = J_2/J_1$  – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Схематически эта модель представлена на рисунке 3.1.

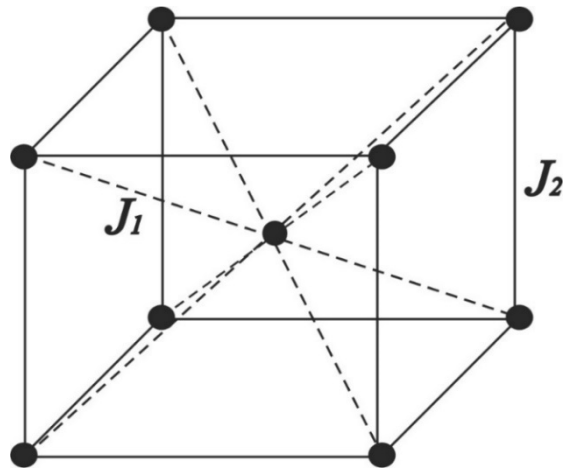


Рис. 3.1. Схематическое изображение объемно-центрированной кубической решетки.

Теоретические расчеты и численное моделирование методом МК для этой модели были проведены в работах [88, 89, 133, 185-188]. Авторы работы [133] методом МК исследовали критическое поведение модели Изинга на различных типах решеток, вычислили температуру ФП и рассчитали значения термодинамических параметров в критической области. Теоретические исследования, выполненные в работах [185, 186], также свидетельствуют, что для модели Изинга на простой кубической решетке и ОЦК решетке имеет место ФП второго рода. Аналогичные результаты получены и в работах [187, 188]. Авторы этих работ рассчитали критические индексы для некоторых термодинамических параметров. Согласно результатам работ [89, 188] переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом первого рода. Можно предположить, что изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей в системе может привести к смене ФП в системе.

В работе [88] рассмотрена модель Изинга на ОЦК решетке с ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями. Рассмотрен частный случай взаимодействий ближайших соседей и вторых ближайших соседей только на одной подрешетке. Анализ линии перехода проведен на основе метода МК и теории ренормализационной группы в приближении Мигдала-Каданова. Авторами

обнаружена линия перехода первого рода, которая заканчивается в мультикритической точке, из которой возникают две линии второго порядка, приводящие к появлению узкой области промежуточного частичного упорядочения, т.е. области сосуществования порядка и беспорядка. Фазовая диаграмма, полученная в рамках теории ренормгруппы, согласуется с диаграммой, полученной методом МК.

Исследования ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых проблем. В данном исследовании нами применен высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК [99, 190]. Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как использование других алгоритмов для определения вероятности отнимает много времени. Кроме того, репличный обменный алгоритм облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией.

Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами  $2(L \times L \times L) = N$ ,  $L = 12 \div 90$ , где  $L$  измеряется в размерах элементарной ячейки. Соотношение обменного взаимодействия следующих и ближайших соседей менялось в интервале  $0.0 \leq k \leq 1.0$  с шагом  $\Delta k = 0.1$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0 = 4 \times 10^5$  МК шагов на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до  $\tau = 500\tau_0$  МК шагов на спин.

Для построения графиков температурной зависимости теплоемкости и восприимчивости использовались соотношения (2.48; 2.49) [46, 181]. Параметр порядка определялся по формуле:

$$m = 3m_1 - m_2 - m_3 - m_4 \quad (3.2)$$

где  $m$  – параметр порядка,  $m_1, m_2, m_3, m_4$  – параметр порядка по подрешеткам.

На рисунках 3.2 и 3.3 представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка от температуры для  $k$  в интервалах значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.7 \leq k \leq 1.0$  для систем с линейными размерами  $L=30$  и  $L=48$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Из рисунка 3.2 видно, что с увеличением  $k$  спад магнитного параметра порядка смещается в сторону более низких температур. В случае, когда  $0.7 \leq k \leq 1.0$ , наблюдается противоположная картина. Температура фазового перехода с увеличением  $k$  смещается в сторону более высоких температур. Это можно объяснить тем, что увеличение взаимодействия вторых ближайших соседей увеличивает вклад энергии взаимодействия по модулю, система становится более устойчивой что, соответственно, повышает температуру ФП.

На рисунках 3.4 и 3.5 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости, полученные при  $L=30$  для различных значений  $k$ . Увеличение значения  $k$  в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$  сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур. Одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов как теплоемкости, так и восприимчивости. Сдвиг максимумов в сторону более низких температур обусловлен усилением конкурирующих взаимодействий вторых ближайших соседей из-за чего система становится более восприимчивой. Рост абсолютных значений максимумов происходит за счет усиления флуктуаций вследствие увеличения конкуренции первых и вторых ближайших соседей.

Отметим, что на зависимостях теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  от температуры, вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением  $L$ . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности выбранного способа добавления ПГУ, а во-вторых, о достижении насыщения по  $N$  для многих исследуемых нами параметров.

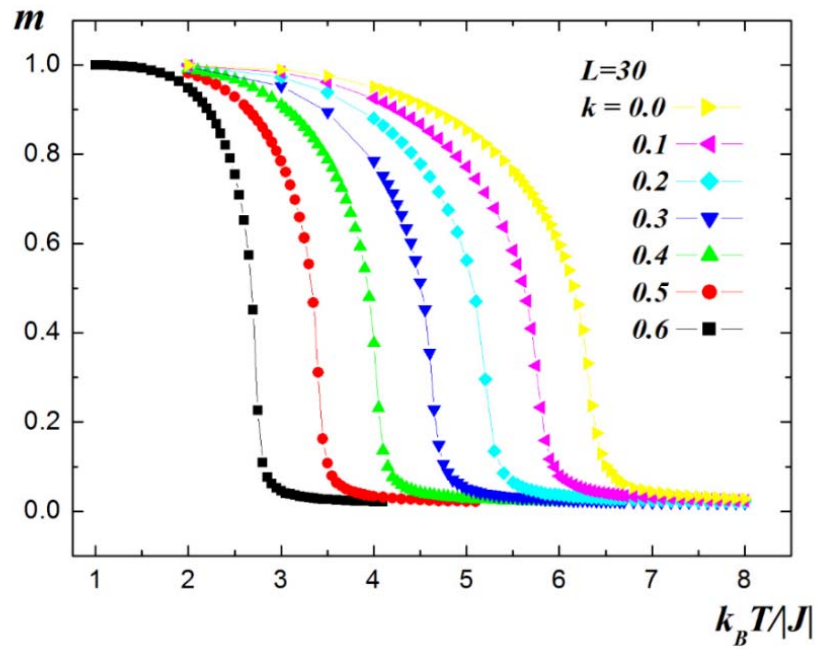


Рис. 3.2. Зависимость параметра порядка  $m$  от температуры  $k_B T / |J|$  для разных значений  $k$ .

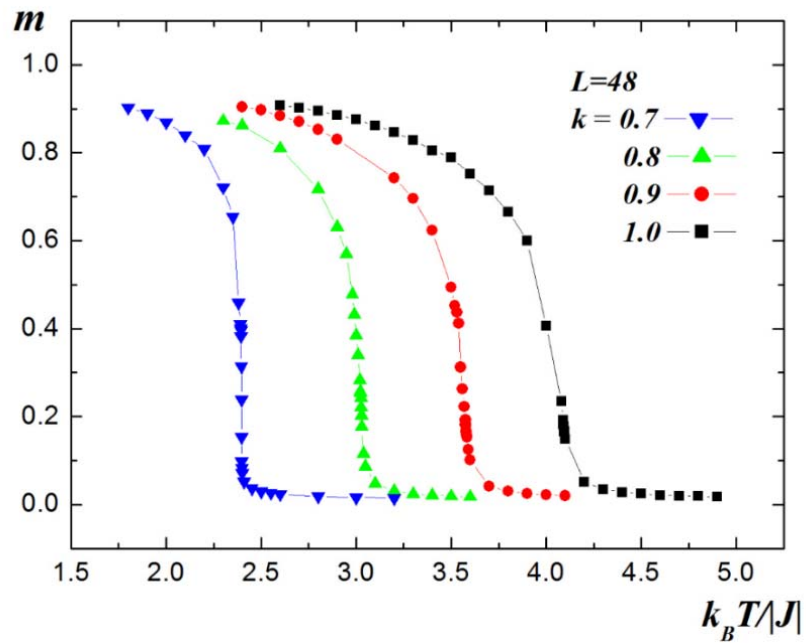


Рис. 3.3. Зависимость параметра порядка  $m$  от температуры  $k_B T / |J|$  для разных значений  $k$ .

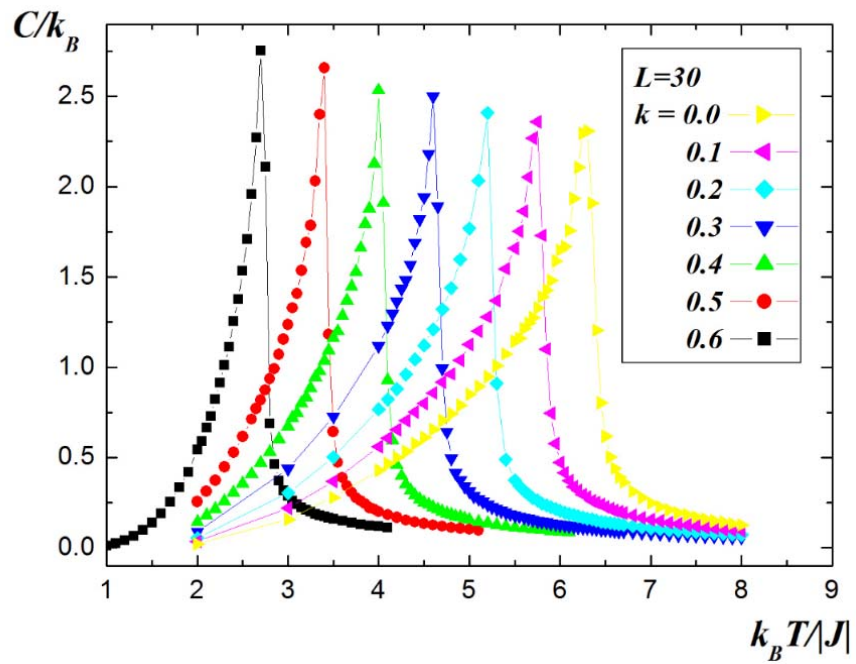


Рис. 3.4. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/J$  для разных значений  $k$ .

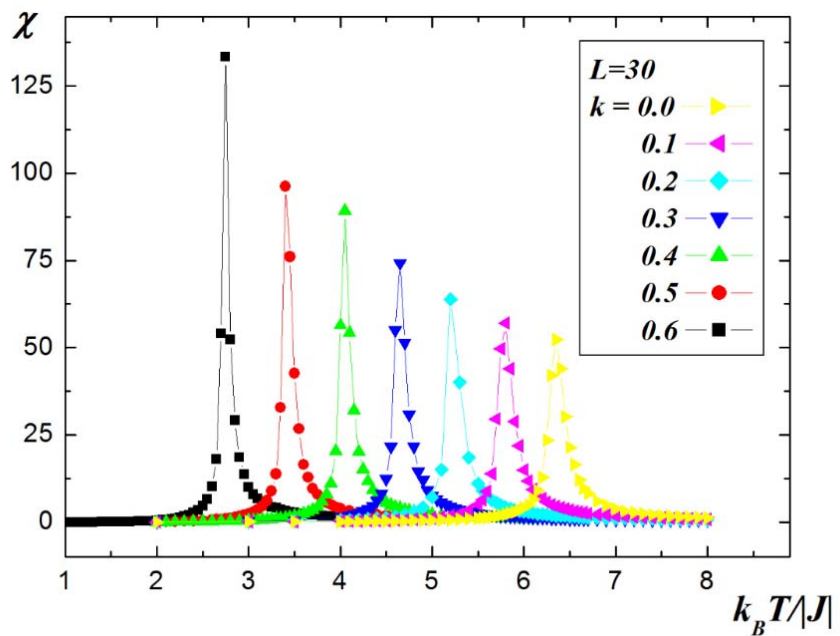


Рис. 3.5. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/J$  для разных значений  $k$ .



Для определения критической температуры  $T_N$ , нами был использован метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка. Выражения (2.55) и (2.56) позволяют определить с хорошей точностью критическую температуру  $T_N$  для ФП второго рода. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера дает возможность также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  имеют четко выраженную точку пересечения [181, 182].

На рисунке 3.6 представлена характерная зависимость  $U_L$  от температуры при  $k=0.0$  для разных значений  $L$ . Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Хорошо видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ( $T_N=6.349(1)$  (здесь и далее температура дана в единицах  $|J/k_B|$ )), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений  $0.0 \leq k \leq 1.0$ . Значение критической температуры, полученное нами для случая  $k=0.0$  очень близко к величине  $T_N=6.354$ , полученной в работах [133, 185].

В таблице 1 представлены значения кумулянтов Биндера в критической точке для разных  $k$ . Как видно, значения кумулянтов Биндера не зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Здесь же для сравнения приведено значение кумулянта Биндера для фрустрированной трехмерной модели Изинга на простой кубической решетке [167], которое в пределах погрешности совпадает с нашими данными.

**Таблица 1.** Значения кумулянтов Биндера в критической точке для разных  $k$ .

$k$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	0.0*
$U_L$	0.482(2)	0.480	0.478	0.480	0.481	0.479	0.478	0.481	0.482	0.480	0.480	0.47(1)

\* данные, полученные в работе [167].

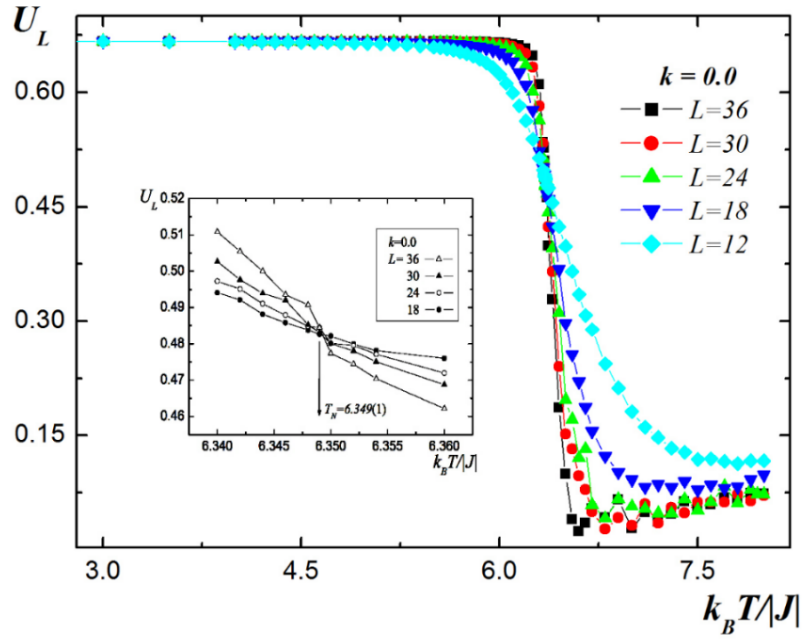


Рис. 3.6. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k = 0.0$ .

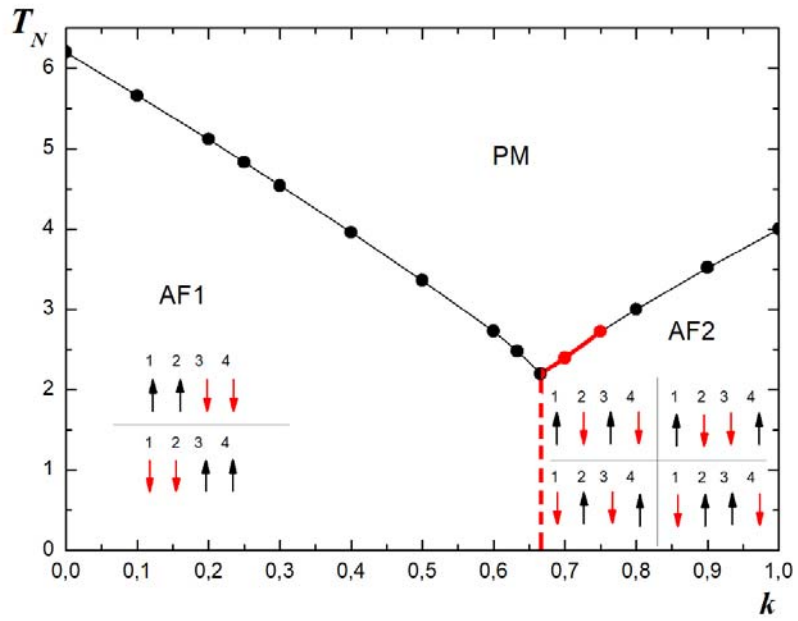


Рис. 3.7. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

На рисунке 3.7 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме мы видим, что вблизи точки  $k=2/3$  пересекаются три различные фазы: AF1 – антиферромагнитная 1-го типа, РМ - парамагнитная и AF2 – антиферромагнитная 2-го типа [89, 188]. На фазовой диаграмме черными и красными стрелками изображены направления спинов во всех подрешетках.

При антиферромагнитном упорядочении 2-го типа  $m_1 = -m_3$ ;  $m_2 = -m_4$ . Эта компоновка представляет собой две взаимопроникающие простые кубические решетки, каждая из которых имеет антиферромагнитное упорядочение. При антиферромагнитном упорядочении 1-го типа  $m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4$  каждый спин имеет восемь ближайших соседей с антипараллельным упорядочением, а его шесть следующих ближайших соседей упорядочены параллельно [89].

На этом рисунке видно, что по мере приближения к значению  $k=2/3$  критическая температура  $T_N$  уменьшается. Можно предположить, что для рассмотренной нами модели при  $k=2/3$  система имеет минимальную температуру ФП. Согласно результатам данной работы, в интервалах значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдаются ФП второго рода [190].

Случай при  $k=0.7$  представляет особый интерес и имеет некоторые особенности, обусловленные поведением термодинамических параметров и типом ФП. Это связано с тем, что вблизи данной точки пересекаются три различные фазы. На рисунке 3.8 мы наблюдаем, что кривая температурной зависимости теплоемкости отличается ярко выраженным спадом значения теплоемкости в области температур  $T \geq T_N$ , что характерно для ФП первого рода.

На рисунках 3.9 и 3.10 представлены зависимости  $U_L$  и  $V_L$  от температуры при  $k=0.7$  для разных значений  $L$ . Видно, что с ростом значения линейных размеров системы кривые кумулянта уходят в область низких температур, а энергетическая зависимость кумулянта от  $T$  не стремится к  $2/3$ , что не свойственно для ФП второго рода.

Для анализа характера ФП и особенностей тепловых характеристик вблизи критической точки весьма эффективным и информативным является гистограммный метод анализа данных [100]. Гистограммный анализ данных позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом МК на основе расчета кумулянтов Биндера, но и определить ряд других важных параметров [103].

Результаты нашей работы показывают, что переход при  $k=0.7$  является ФП первого рода. Это демонстрируют рисунки 3.11 и 3.12, на которых представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами  $L=48$ ,  $L=60$ ,  $L=72$  и  $L=90$ . Графики построены при критической температуре  $T_N$ . На рисунках 3.11 и 3.12 видно, что в зависимости вероятности  $P$  от энергии  $U$  для систем с линейными размерами  $L=48$ ,  $L=60$  и  $L=72$  наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности на гистограмме распределения энергии является свидетельством наличия ФП первого рода. Однако, как видно из рисунка 3.12, для системы с линейными размерами  $L=90$  наблюдается один максимум. Видимо, это связано с тем, что при исследовании систем с большими линейными размерами два пика наблюдаются только в очень узкой температурной области.

Для всех остальных значений  $k$  в зависимости вероятности  $P$  от энергии  $U$  для систем даже с малыми линейными размерами наблюдается один максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

На рисунках 3.13 и 3.14 приведены гистограммы распределения энергии для случаев  $k=0.0$  и  $k=0.9$ . Графики построены в критической точке  $T_N$  для решеток с размерами  $L=90$ . На рисунках мы наблюдаем один пик, что характерно для ФП второго рода [100, 103]. Аналогичные гистограммы, которые свидетельствуют о том, что в интервалах значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдаются ФП второго рода, были построены и для остальных значений  $k$ . Из полученных нами результатов следует, что переход из AF1 фазы в PM фазу является ФП второго рода, аналогичные результаты получены в работах [89, 188].

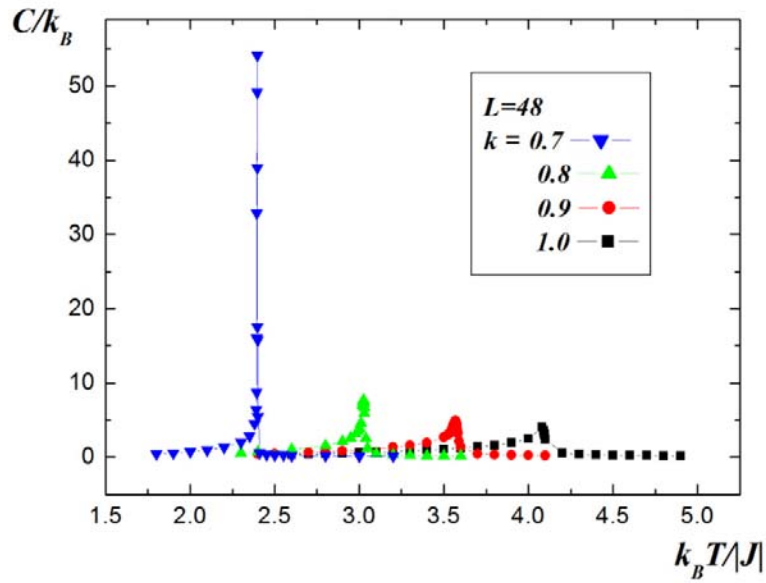


Рис. 3.8. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  для значений  $0.7 \leq k \leq 1.0$ .

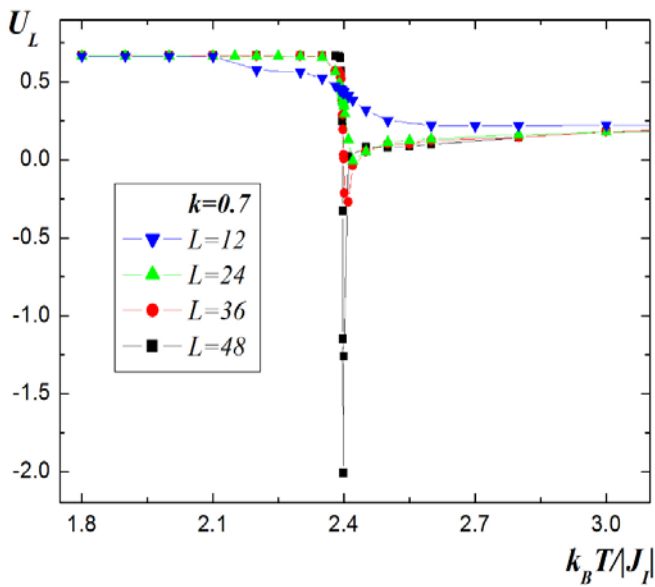


Рис. 3.9. Зависимость кумулянта биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T/|J|$  для  $k=0.7$ .

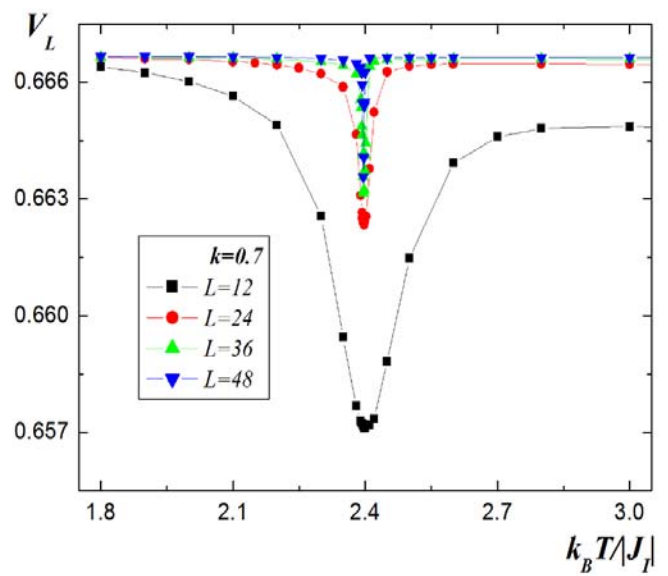


Рис. 3.10. Зависимость кумулянта биндера  $V_L$  от температуры  $k_B T/|J|$  для  $k=0.7$ .

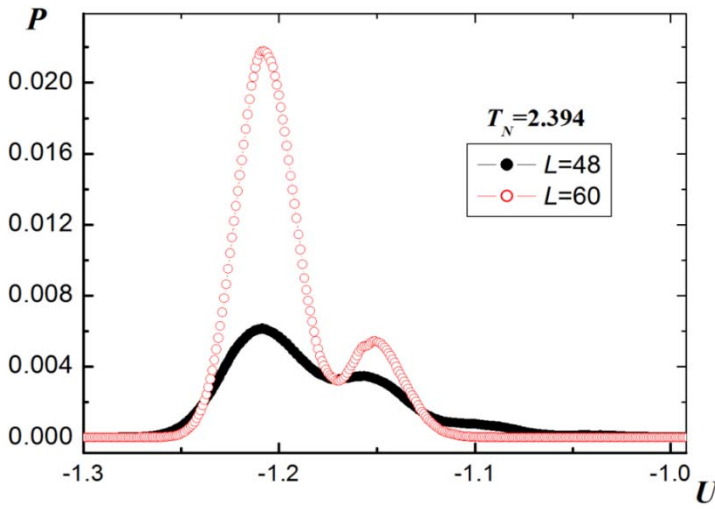


Рис. 3.11. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.7$ .

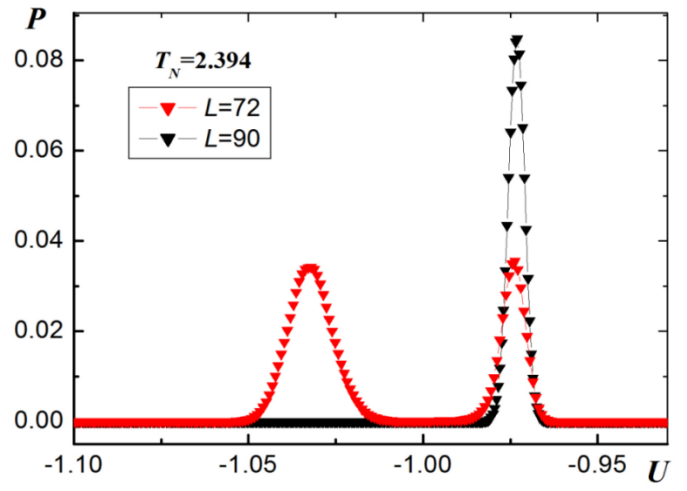


Рис. 3.12. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.7$ .

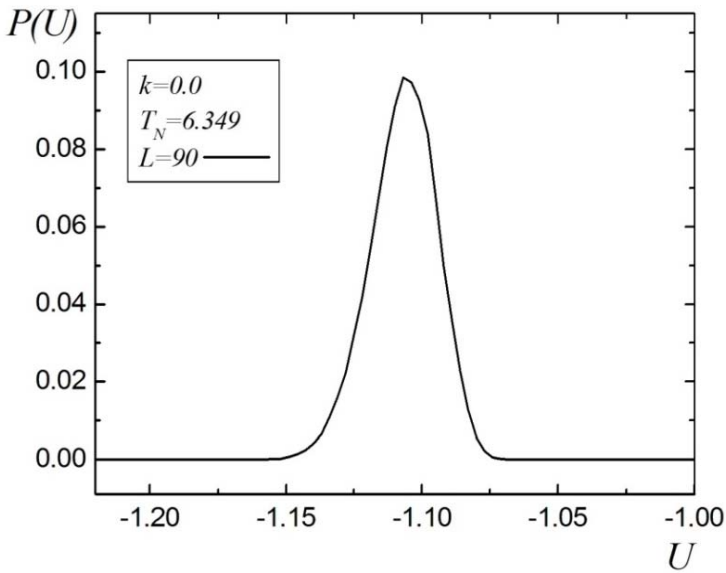


Рис. 3.13. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.0$ .

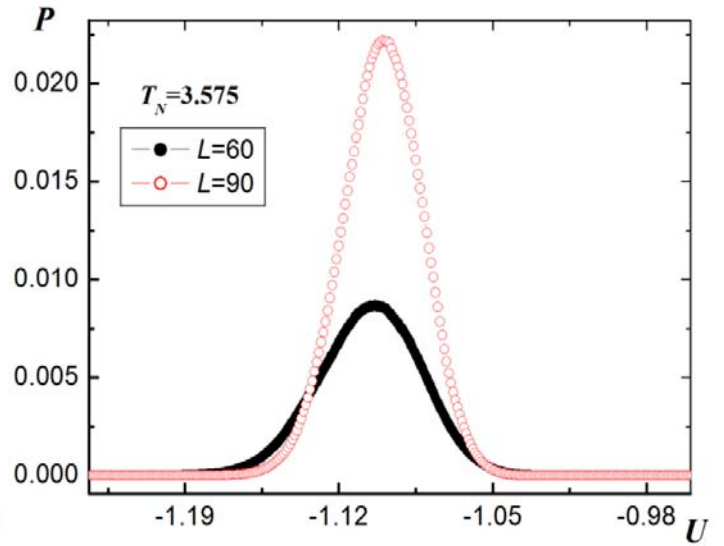


Рис. 3.14. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.9$ .

Для достижения большей достоверности результатов, полученных репличным алгоритмом метода МК, мы более подробно исследовали особенности, наблюдающиеся для этой модели вблизи точки пересечения трех различных фаз алгоритмом Ванга-Ландау [100]. В стандартный алгоритм Ванга-Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Алгоритм Ванга-Ландау основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний  $g(E)$ , мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний  $g(E)$ , зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний  $g(E)$  очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной  $\ln g(E)$  [102, 125].

На рисунках 3.15 и 3.16 представлены температурные зависимости энергии и теплоемкости, полученные на основе репличного обменного алгоритма (REMC) и алгоритма Ванга-Ландау (WLA) (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Рисунки демонстрируют, что данные полученные разными алгоритмами достаточно хорошо соответствуют друг с другом. Это позволяет говорить о надежности и точности полученных в работе результатов и что особенности наблюдаемые в этой области не связаны с используемым алгоритмом.

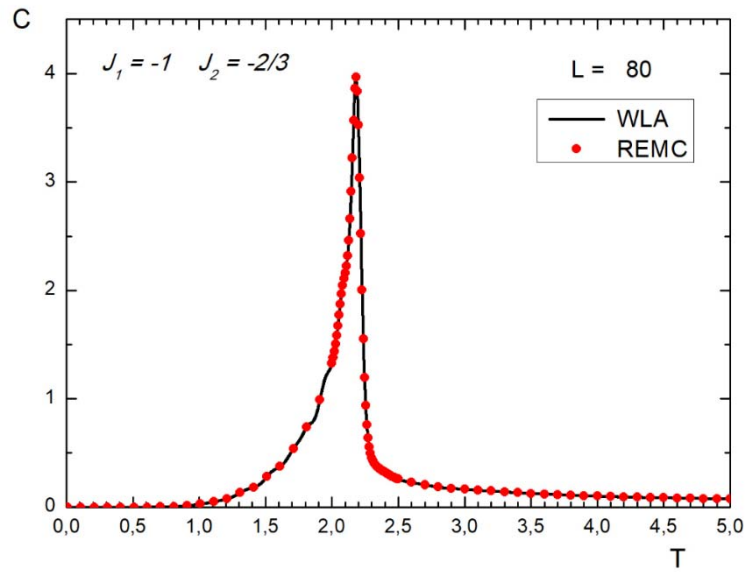


Рис. 3.15. Температурные зависимости теплоемкости  $C$  для систем с линейными размерами  $L=80$ .

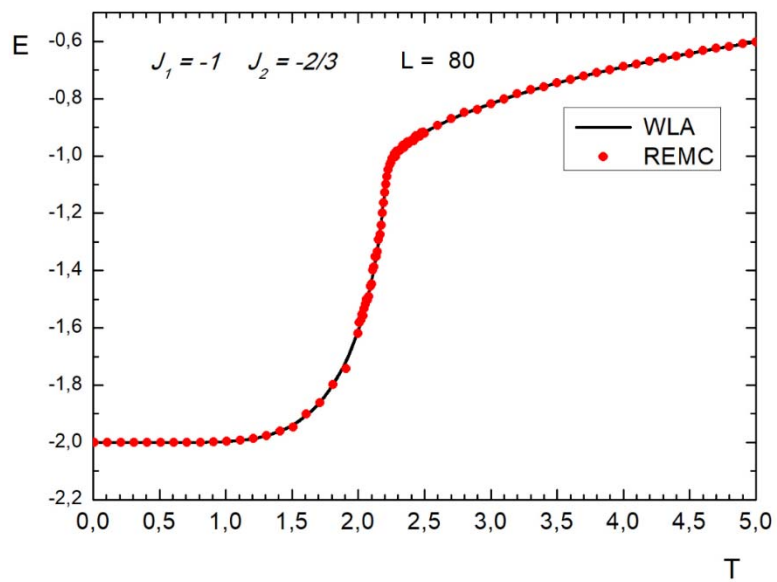


Рис. 3.16. Температурные зависимости энергии  $E$  для систем с линейными размерами  $L=80$ .



На рисунке 3.17 приведены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели, полученные с помощью алгоритма Ванга-Ландау. Преимуществом этого алгоритма в том, что он позволяет на основе анализа плотности состояний и энергетических состояний в области основного состояния определить и графически отобразить структуру основного состояния. На этом рисунке цифрами 1-6 показаны все возможные магнитные структуры основного состояния, наблюдаемые в данной модели.

Как видно на диаграмме (рис. 3.7) в фазе AF1 могут реализоваться только две структуры основного состояния (рис. 3.17, 1-2). В фазе AF2 реализуются четыре структуры основного состояния (рис. 3.17, 3-6). Вдоль вертикальной пунктирной линии, соответствующей значению  $k=2/3$  сосуществуют все шесть структур одновременно (рис. 3.17, 1-6).

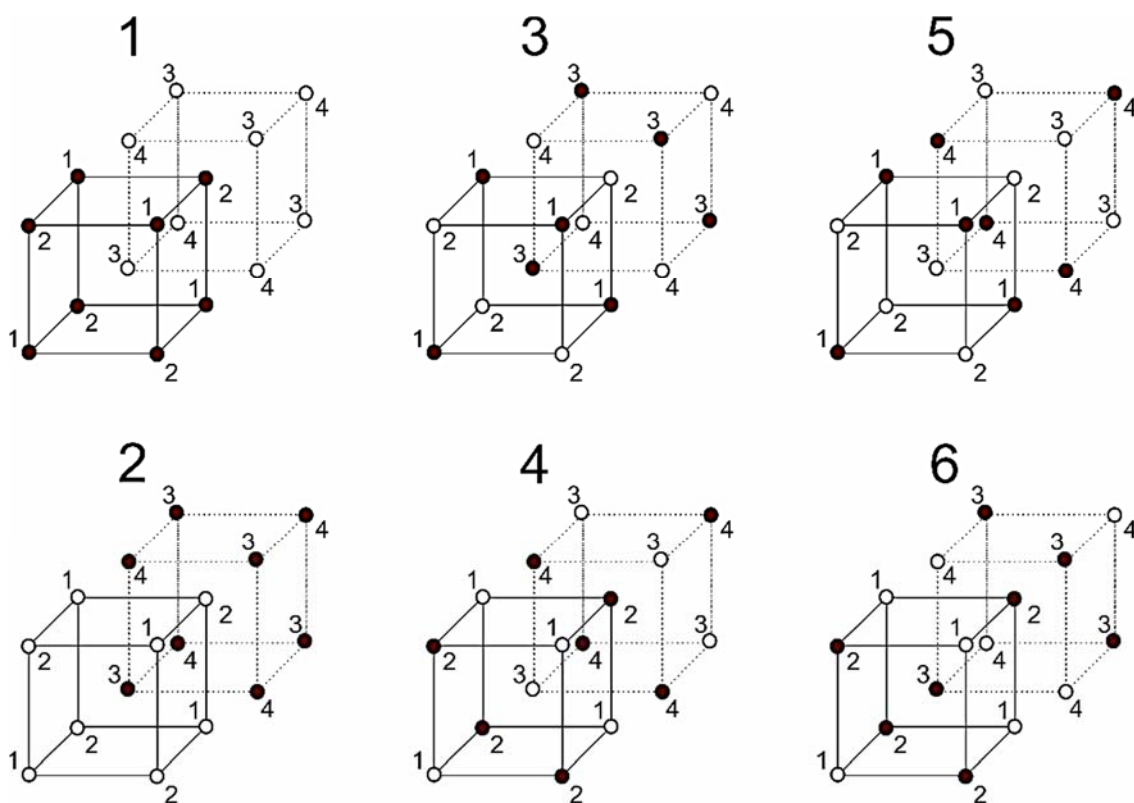


Рис. 3.17. Магнитные структуры основного состояния модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

Плотности состояний  $g(E)$  для систем с различными линейными размерами  $L$  представлены на рисунках 3.18 и 3.19 (увеличенная вставка из графика 3.18). На графике 3.19 видно, что в данной системе вырождение основного состояния стремится к  $\ln 6$ . Это говорит о том, что в исследуемой модели конкуренция обменного взаимодействия вторых ближайших соседей не приводит к возникновению фрустрации, в отличие от модели Изинга на квадратной решетке [102], но в системе наблюдается вырождение основного состояния кратное 6 соответствующим магнитным структурам на рисунке 3.17.

Температурная зависимость энтропии  $S$  приведена на рисунке 3.20. Видно, что с увеличением температуры энтропия системы стремится к теоретически предсказанному значению  $\ln 2$ . При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия системы стремится к нулю. Такое поведение энтропии также позволяет говорить о том, что в данной модели конкуренция обменного взаимодействия не приводит к возникновению фрустраций.

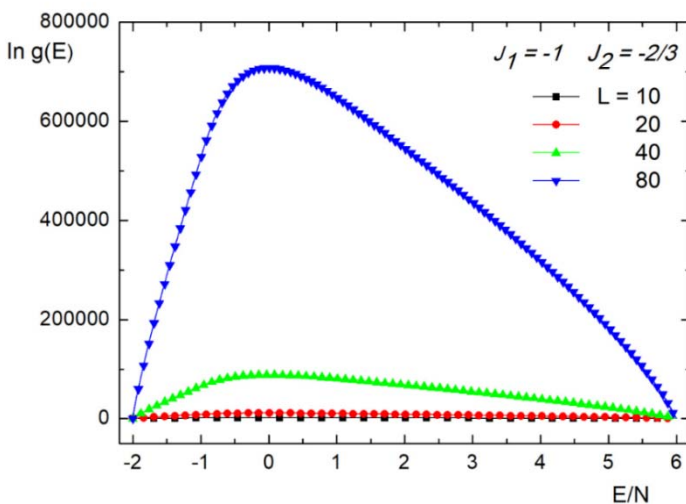


Рис. 3.18. Плотность состояний  $g(E)$  для систем с разными линейными размерами  $L$ .

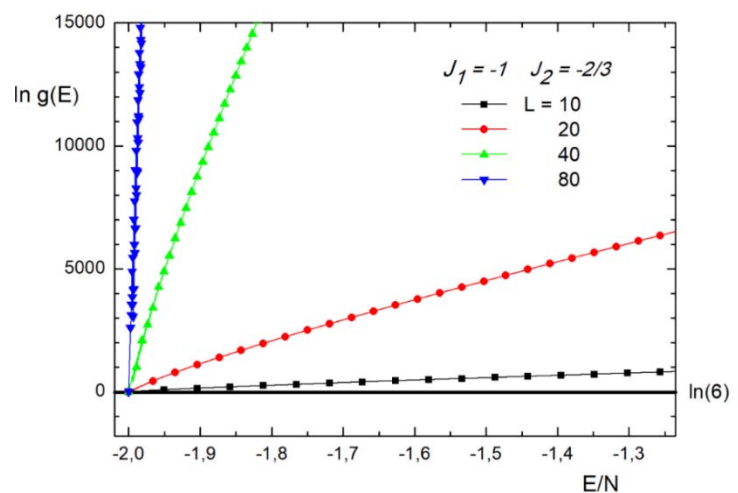


Рис. 3.19. Плотность состояний  $g(E)$  для систем с разными линейными размерами  $L$ .

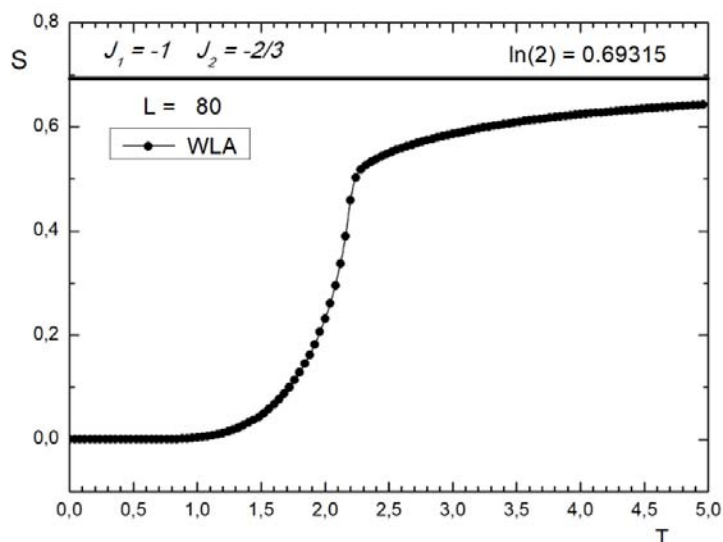


Рис. 3.20. Температурная зависимость энтропии  $S$  для систем с линейными размерами  $L=80$ .

Гистограммы, полученные с помощью алгоритма Ванга-Ландау, в интервалах  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.8 \leq k \leq 1.0$  полностью согласуются с гистограммами, полученными на основе репличного обменного алгоритма. Более подробное исследование интервала  $2/3 \leq k \leq 0.75$  показало, что для случая  $k=2/3$  наблюдается ФП второго рода. Это продемонстрировано на рисунке 3.21, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L=80$ . Графики построены при критической температуре ( $T_N=2.200$ ) и вблизи нее. На рисунках видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E/N$  для всех значений температур наблюдаются один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

На рисунке 3.22 приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами  $L=80$  для случая  $k=2/3$ . По оси иксов отложено количество Монте-Карло шагов на спин (NMCS). Результаты приведены для трех температур: в точке ФП, а также выше и ниже критической температуры. Данные на графике подтверждают результаты рисунка 3.21: энергия для всех температур совершает случайные флуктуации вблизи равновесного значения, соответствующего максимуму вероятности  $W(E/N)$ .

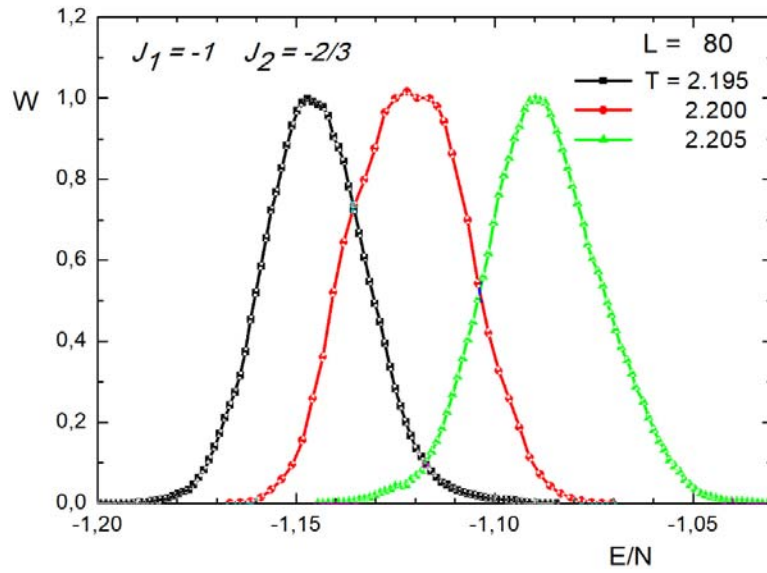


Рис. 3.21. Гистограмма распределения энергии для  $k=0.66$  при  $L=80$ .

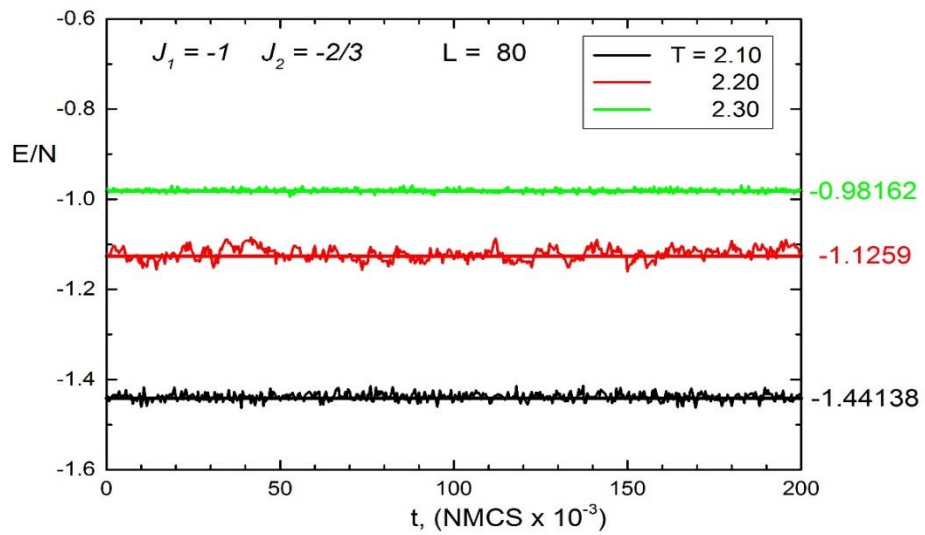


Рис. 3.22. Временная динамика внутренней энергии при различных температурах для  $k=2/3$  при  $L=80$ .

На рисунке 3.23 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L=80$  для случая  $k=0.7$ . Как видно, для всех значений температур наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют в пользу ФП первого рода. Такое же поведение наблюдается и для значения  $k=0.75$ . Аналогичный результат для случая  $k=0.7$  был получен и репличным алгоритмом для систем с линейными размерами  $L \leq 72$ . Таким образом, результаты данного исследования показывают, что на фазовой диаграмме (рис. 3.7) наблюдается узкая область ( $2/3 < k \leq 0.75$ ), в которой переход реализуется как ФП первого рода.

Это подтверждается данными рисунка 3.24, где приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами  $L=80$  для случая  $k=0.7$ . Результаты также представлены для трех температур: в точке ФП ( $T=2.386(5)$ ), а также выше и ниже критической температуры ( $T=2.3$  и  $T=2.6$  соответственно). Как видно из графика, в точке ФП имеются два метастабильных энергетических уровня  $E_1=-1.23565$  и  $E_2=-0.99860$ . Система совершает случайные флуктуации около этих двух энергетических состояний. Энергия  $E_1$  соответствует первому максимуму вероятности  $W(E/N)$ , а  $E_2$  - второму максимуму на рисунке 3.23. Такое поведение характерно для ФП первого рода.

В результате анализа наших данных можно сказать, что впервые определены все возможные магнитные структуры основного состояния, соответствующие различным областям фазовой диаграммы. Показано, что в зависимости от величины  $k$  в системе возможно 6 различных упорядочений в основном состоянии. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. Впервые на диаграмме обнаружена узкая область ( $2/3 < k \leq 0.75$ ), где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Показано, что при значении  $k=2/3$  наблюдается ФП второго рода, и конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению полностью фрустрированного состояния.

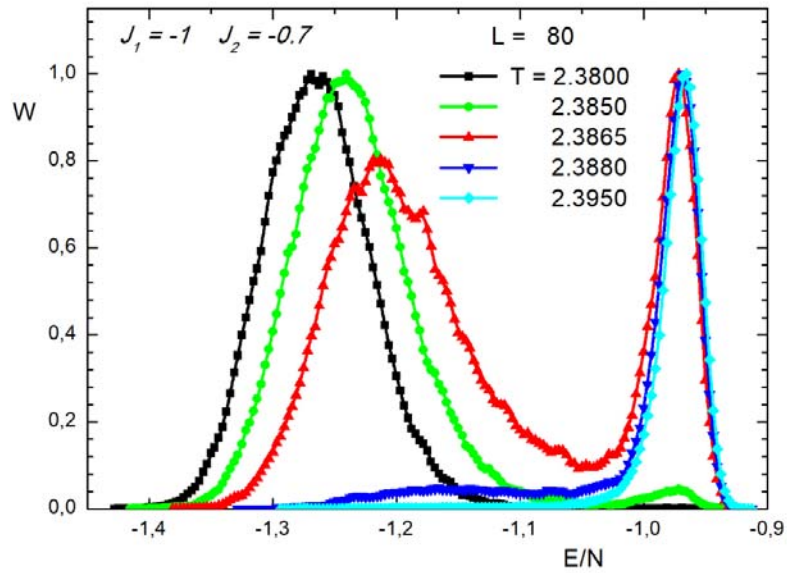


Рис. 3.23. Гистограмма распределения энергии для  $k=0.7$  при  $L=80$ .

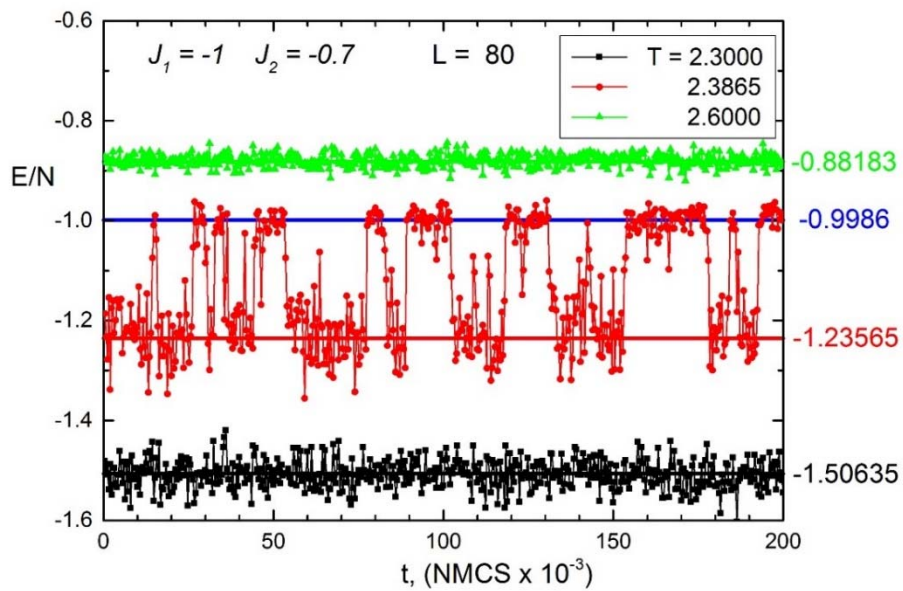


Рис. 3.24. Временная динамика внутренней энергии при различных температурах для  $k=2/3$  и  $L=80$ .

### 3.2. Анализ результатов численного эксперимента

Для расчета статических критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , параметра порядка  $\beta$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индекса Фишера  $\eta$  применялись соотношения теории КРС [34, 46].

Из теории КРС следует, что в системе с размерами  $2(L \times L \times L)$  при  $T=T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие соотношения (2.21, 2.22, 2.28, 2.59, 2.60) [29, 190]. Эти выражения использованы нами для определения  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\nu$ .

На рисунках 3.25 и 3.26 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров  $V_n$  при  $n=1, 2, 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $k=0.3$  и  $k=0.9$ . Как видно из рисунков, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямые. Зависимости на рисунках, приведенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Углы наклона прямых определяют значения  $1/\nu$ . Вычисленные таким образом значения  $\nu$  использованы для определения критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$  и параметра порядка  $\beta$ .

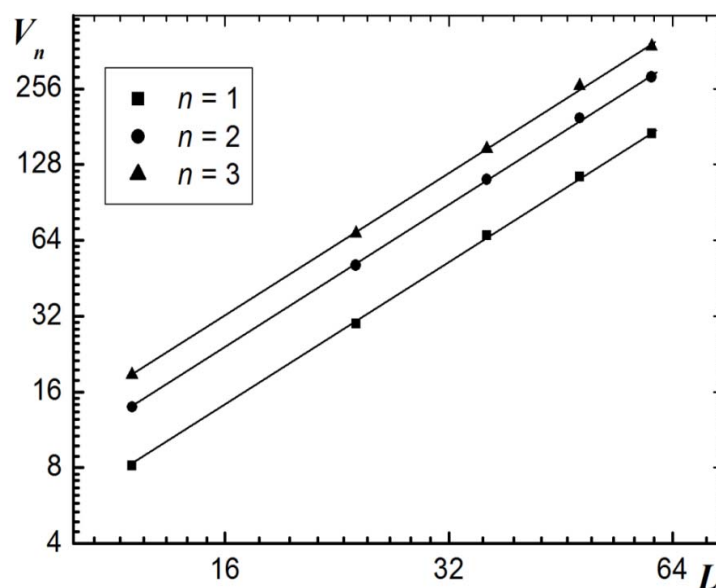


Рис. 3.25. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .

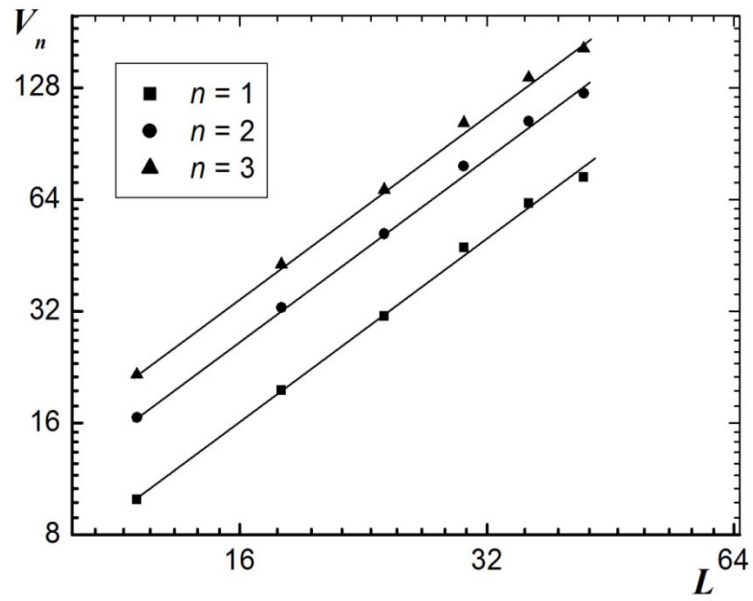


Рис. 3.26. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .

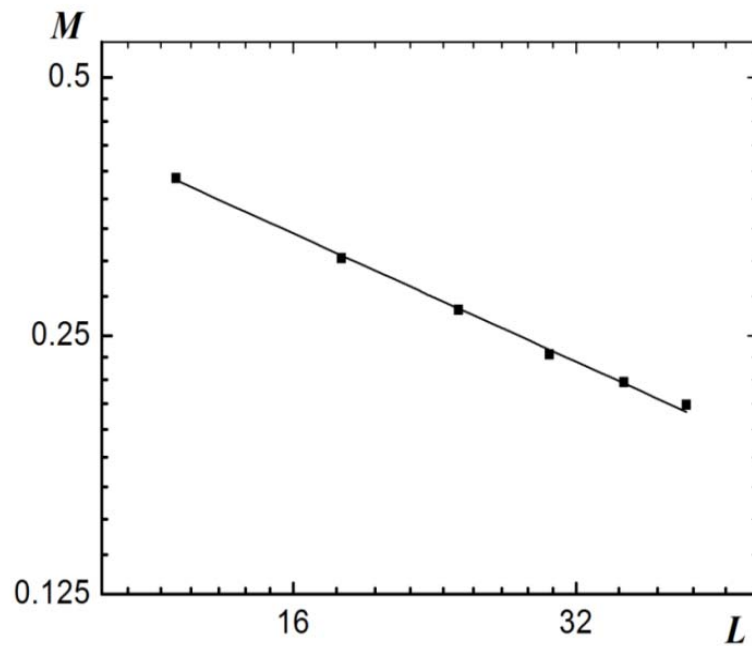


Рис. 3.27. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .



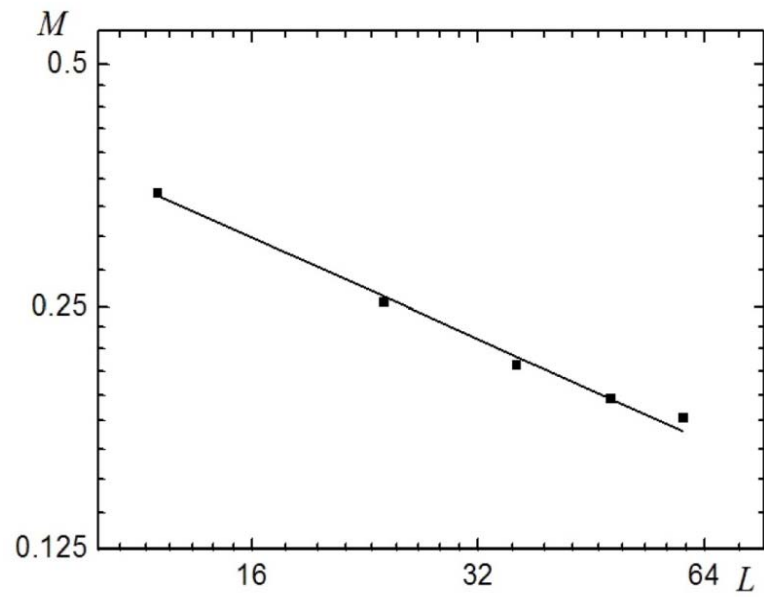


Рис. 3.28. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .

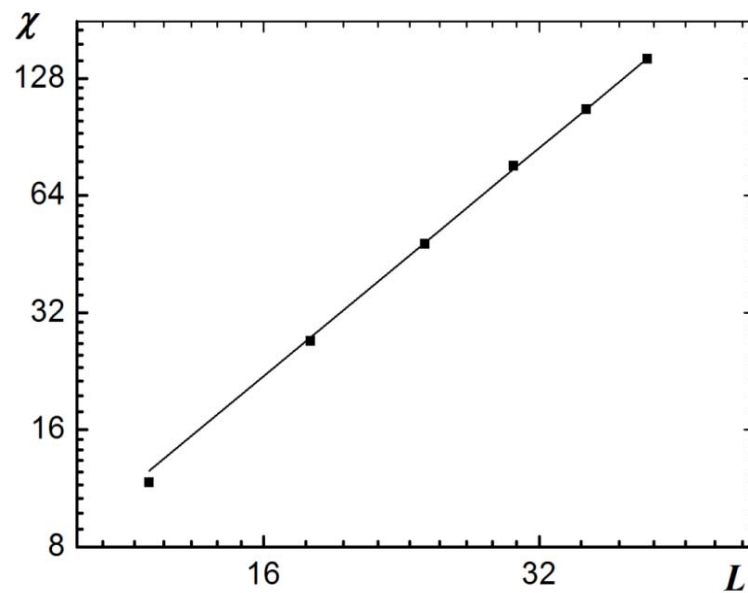


Рис. 3.29. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.3$ .

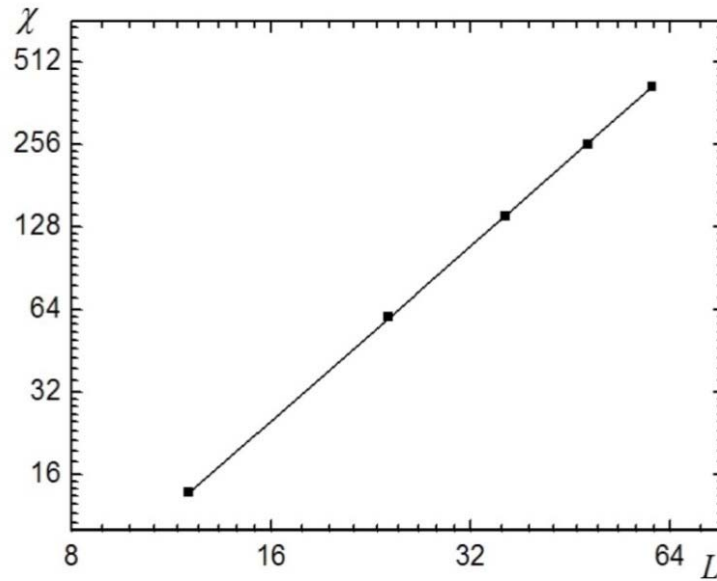


Рис. 3.30. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.9$ .

На рисунках 3.27, 3.28, 3.29 и 3.30 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка  $M$  и восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $k=0.3$  и  $k=0.9$ . Все точки в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$ . По этой схеме на основе выражения (2.60) были определены значения и для теплоемкости  $\alpha/\nu$ . На основе данных по  $\nu$  вычислены статические критические индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ .

Эта процедура была использована для расчета критических индексов при значениях  $k=1.0$ ; 0.9; 0.8; 0.6; 0.5; 0.4; 0.3; 0.2, 0.1 и 0.0 в случае, когда происходит ФП второго рода. Все значения статических критических индексов, полученные таким образом, представлены в таблице 2.

Как видно из таблицы, почти все значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$ , в пределах погрешности совпадают между собой. Это свидетельствует о том, что в этом интервале система проявляет универсальное критическое поведение. В интервале  $0.8 \leq k \leq 1.0$ , значения критических индексов отличаются от соответствующих значений из интервала  $0.0 \leq k \leq 0.6$ . Можно предположить, что при увеличении величины взаимодействия

следующих ближайших соседей в системе происходит смена класса универсальности критического поведения. Кроме того, в интервале  $0.8 \leq k \leq 1.0$  индексы меняются с изменением  $k$ . Это позволяет нам говорить о том, что в этом интервале наблюдается неуниверсальное критическое поведение. Неуниверсальность критического поведения связана с конкуренцией обменных взаимодействий между ближайшими и следующими соседями. Это следует из решения Бэкстера для точно решаемой восьмивершинной модели [41]. Мы предполагаем, что неуниверсальность критического поведения обусловлена усилением конкуренции обменных взаимодействий между ближайшими и следующими соседями при  $k > 2/3$ . Аналогичное поведение было предсказано также и для трехмерной модели Ашкина-Теллера на кубической решетке [191].

Отметим, что полученные нами значения критических индексов в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$ , в пределах погрешности совпадают с соответствующими значениями критических индексов для нефрустрированной трехмерной модели Изинга [192]. Это подтверждает принадлежность исследованной нами модели в этом интервале к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная модель Изинга на кубической решетке.

В таблице 3 для сравнения численных значений критических индексов, полученных нами в данной работе, приведены литературные данные для аналогичной модели. Сравнение наших результатов для интервала  $0.0 \leq k \leq 0.6$  показывает, что они находятся в хорошем согласии, как с теоретическими данными [185, 193-195], так и с данными, полученными методом МК [89, 196-198] другими авторами. Некоторые критические параметры для данной модели при различных значениях  $k$  рассчитаны нами впервые.

**Таблица 2.**

Значения критических индексов для  $3d$  антиферромагнитной модели Изинга с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей на объемно-центрированной кубической решетке.

$k$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$	$\eta$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
<b>0.0</b>	0.13(2)	0.31(1)	1.23(1)	0.63(1)	0.04(2)	1.98
<b>0.1</b>	0.13(2)	0.30(1)	1.24(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.97
<b>0.2</b>	0.13(2)	0.31(1)	1.23(1)	0.62(1)	0.02(2)	1.98
<b>0.3</b>	0.12(2)	0.31(1)	1.25(1)	0.64(1)	0.04(2)	1.99
<b>0.4</b>	0.13(2)	0.31(1)	1.22(1)	0.63(1)	0.05(2)	1.97
<b>0.5</b>	0.12(2)	0.31(1)	1.24(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.98
<b>0.6</b>	0.13(2)	0.31(1)	1.22(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.97
<b>0.8</b>	0.63(2)	0.20(1)	1.0(1)	0.48(1)	-0.07(2)	2.03
<b>0.9</b>	0.47(2)	0.22(1)	1.12(1)	0.54(1)	-0.05(2)	2.03
<b>1.0</b>	0.40(2)	0.25(1)	1.14(1)	0.58(1)	-0.01(2)	2.04
Нефрустри- рованная модель Изинга [192]	0.108(9)	0.3265(25)	1.239(4)	0.6305(25)	0.037(3)	1.999

**Таблица 3.**

Значения критических индексов  $\gamma$  и  $\nu$  для трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке (литературные данные).

Критический параметр		$\gamma$	$\nu$
Теория	[185]	1.23742(20)	0.6308(10)
	[193]	1.2378(6)	0.6311(3)
	[194]	1.2380(50)	0.6305(25)
	[195]	1.2371(4)	0.63002(23)
Метод МК	[84]	1.25(2)	0.64(2)
	[196]	1.2367(11)	0.6296(7)
	[197]	1.237(2)	0.6301(8)
	[198]	1.2372(17)	0.6303(6)

### 3.3 Критические свойства модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей

В данном параграфе рассмотрены результаты исследования  $3d$  антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

Гамильтониан этой модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_l) \quad (3.3)$$

где  $|\vec{S}_i|$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ . Первый член в формуле (3.3) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей  $J_1 < 0$ , а второй – вторых ближайших соседей  $J_2 < 0$ . В данной работе рассматривается случай, когда  $k = J_2/J_1$ , где  $k$  – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Схематически эта модель представлена на рисунке 3.31. Каждый атом имеет 8 ближайших и 6 вторых ближайших соседей. Решетка разделена на четыре взаимопроникающие подрешетки. Каждая из этих подрешеток имеет гранецентрированную кубическую структуру, как показано на рисунке [95].

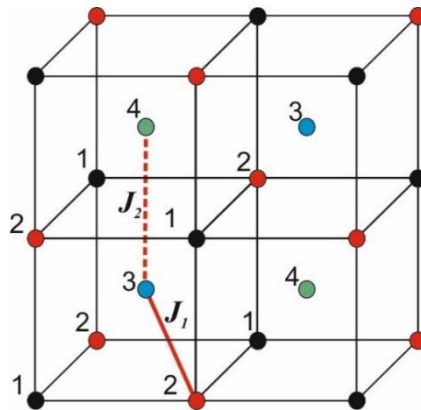


Рис. 3.31. ОЦК-решетка. Цифрами обозначены 4 подрешетки.

Насколько нам известно, исследования классической системы Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей методом МК до сих пор не проводились.

В исследования данной модели нами был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК [99].

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости были использованы флуктуационные соотношения (2.48, 2.49). Параметр порядка определялся по формуле:

$$\bar{m} = 3\bar{m}_1 - \bar{m}_2 - \bar{m}_3 - \bar{m}_4, \quad (3.4)$$

где  $m$  – параметр порядка,  $\bar{m}_1, \bar{m}_2, \bar{m}_3, \bar{m}_4$  – параметры порядка по подрешеткам.

Температуры ФП для всех  $k$  были найдены с использованием высокоточного метода кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка (2.55). Согласно теории КРС, точка пересечения всех кривых  $U_L$  в их температурной зависимости является критической точкой [181, 182].

Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами  $2(L \times L \times L) = N$ ,  $L = 24 \div 90$ , где  $L$  измерялась в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0 = 4 \times 10^5$  МК шагов на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до  $\tau = 500\tau_0$  МК шагов на спин.

На рисунках 3.32, 3.33 представлены характерные зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  и  $V_L$  от температуры для  $k=0.6$ . Из графиков видно, что кумулянты для разных  $L$  пересекаются в одной точке, которая является критической точкой ( $T_N=0.871$ ). Эти значения  $T_N$  и были нами использованы в дальнейшем в качестве критической температуры. Кроме того, из вставки к рисунку 3.33 наглядно видно, что нетривиальная величина  $V^*$  стремится к значению  $2/3$  при  $L \rightarrow \infty$ , что является одной из характерных черт ФП второго рода [183]. Эта величина рассчитана из выражения (2.57). Из рис. 3.33 видно, что для исследуемой модели  $V^* = 0.6666(5)$ .

Аналогичным образом были определены значения критических температур и при других значениях  $k = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ . Все эти данные представлены в таблице 4.

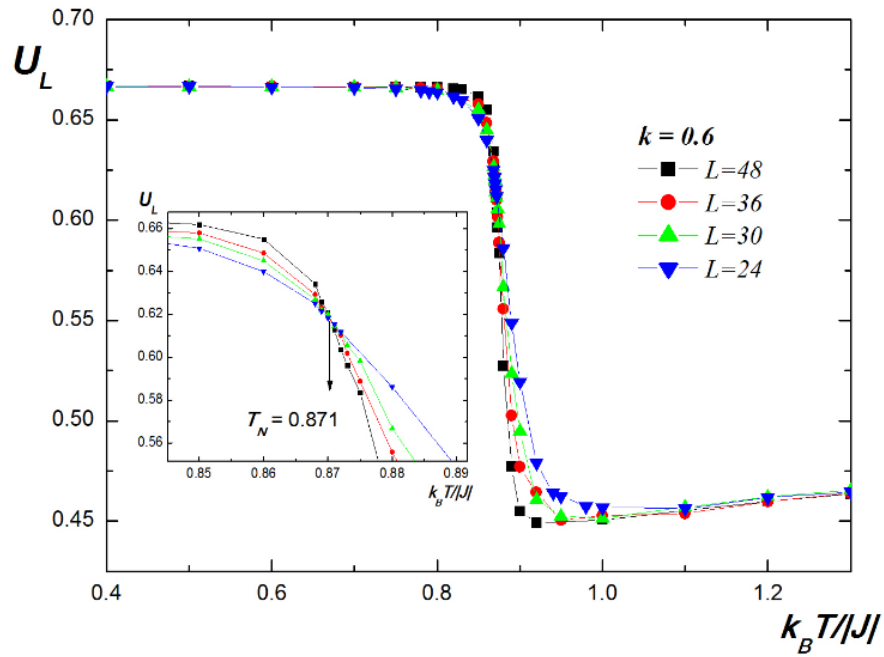


Рис. 3.32. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k = 0.6$ .

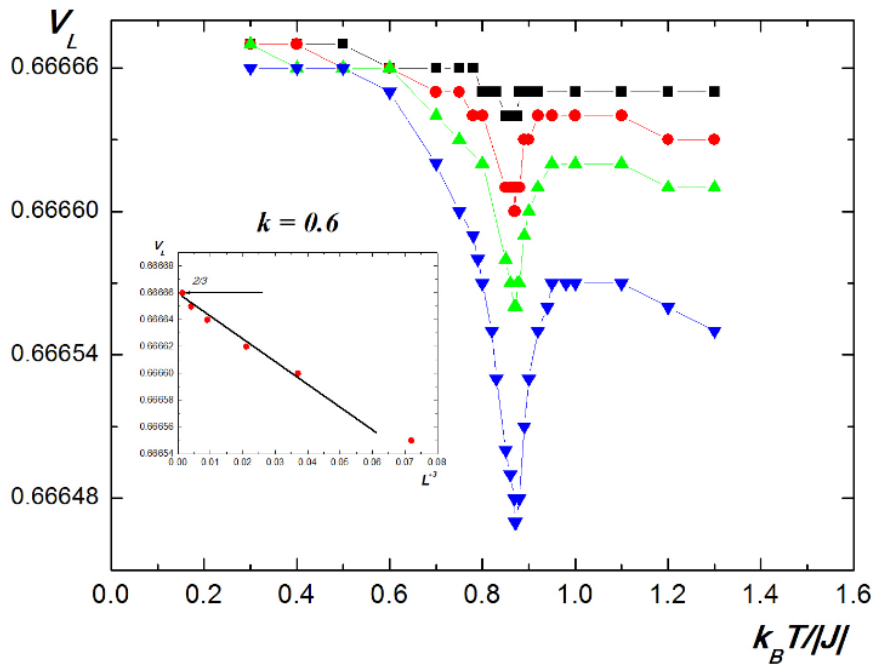


Рис. 3.33. Зависимость кумулянта биндера  $V_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k = 0.6$ .

Зависимости для магнитного параметра порядка от температуры для  $k$  в интервале значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  для систем с линейными размерами  $L=48$  приведены на рисунке 3.34. Видно, что с увеличением  $k$  спад магнитного параметра порядка смещается в сторону более низких температур. Отметим, что высокотемпературные «хвосты» намагниченности практически отсутствуют.

Температурные зависимости для теплоемкости и восприимчивости для  $k$  в интервалах значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.68 \leq k \leq 1.0$  для систем с линейными размерами  $L=48$  приведены на рисунках 3.35, 3.36 и 3.37. Рисунки 3.35 и 3.36 демонстрируют, что рост значения  $k$  сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов восприимчивости. Очевидно, что это связано с усилением конкурирующих взаимодействий вторых ближайших соседей, вследствие чего система становится более восприимчивой. На рисунке 3.37 наблюдаем противоположную картину. С увеличением  $0.68 \leq k \leq 1.0$  температура ФП смещается в сторону более высоких температур. Это можно объяснить тем, что с дальнейшим увеличением взаимодействия вторых ближайших соседей система становится более жесткой, что соответственно повышает температуру ФП.

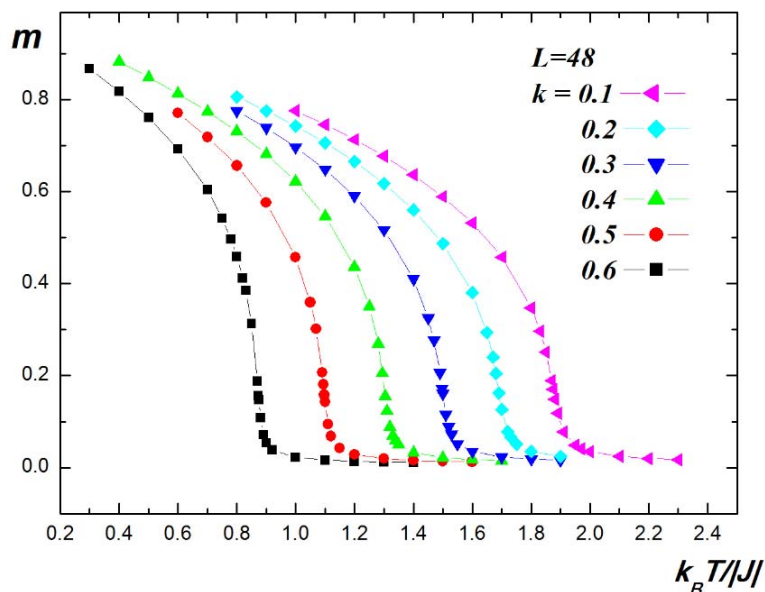


Рис. 3.34. Зависимость параметра порядка  $m$  от температуры  $k_B T / J$  для разных значений  $k$  при  $L=48$ .



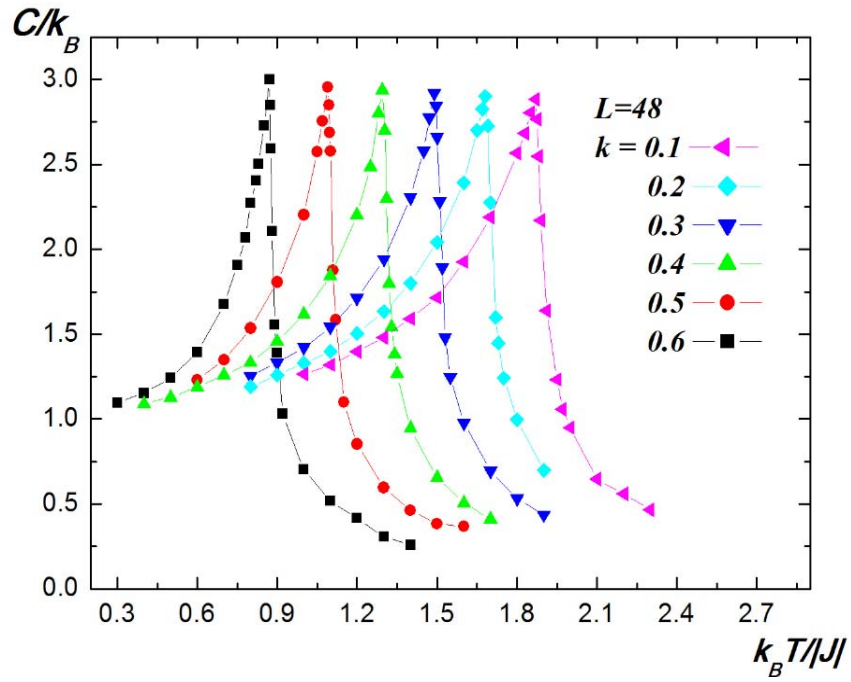


Рис. 3.35. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/J$  для разных значений  $k$  при  $L=48$ .

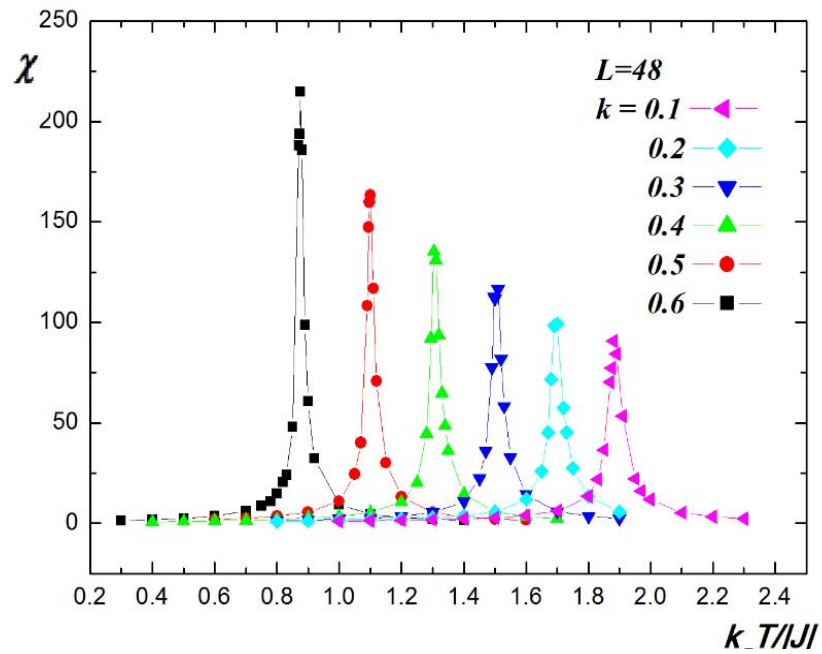


Рис. 3.36. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/J$  для разных значений  $k$  при  $L=48$ .

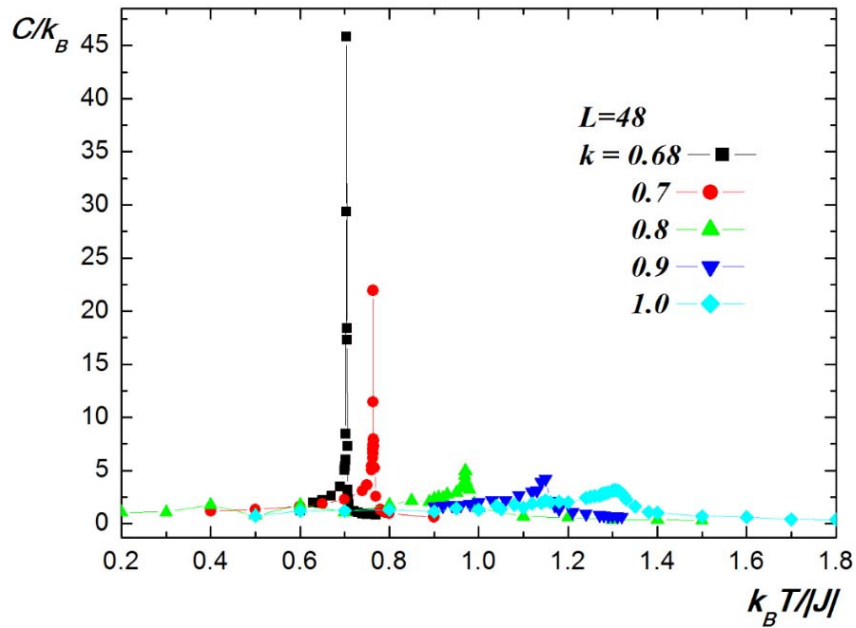


Рис. 3.37. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/J$  для разных значений  $k$  при  $L=48$ .

Для расчета статических критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$  и индекса радиуса корреляции  $\nu$  были использованы выражения (2.21), (2.22), (2.28), (2.59) и (2.60) [46, 53, 54].

На рисунках 3.38 и 3.39 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров  $V_n$  для  $n=1; 2; 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $k=0.2$  и  $k=0.6$ . Как видно, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямые. Угол наклона прямой определяет значения  $1/\nu$ . Эти прямые расположены параллельно друг другу, что говорит о том, что все три значения индекса  $\nu$  хорошо совпадают между собой.

Затем, по аналогичной схеме были построены характерные зависимости магнитного параметра порядка  $m$ , магнитной восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  от линейных размеров решетки  $L$  для всех значений  $k$ .

На рисунках 3.40-3.43 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка, магнитной восприимчивости от линейных размеров решетки  $L$  при  $k=0.2$  и  $0.6$ . Из рисунков видно, что все данные «ложатся» на прямые, угол наклона которых определяет

значение  $\alpha/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ . По этой схеме определены значения  $\alpha/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $1/\nu$  и для всех значений  $k$ . Далее с помощью полученных в рамках данного исследования значений  $\nu$  рассчитывались  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . С помощью соотношений теории КРС были рассчитаны магнитные критические индексы для этой модели при значениях  $0.0 \leq k \leq 0.6$ .

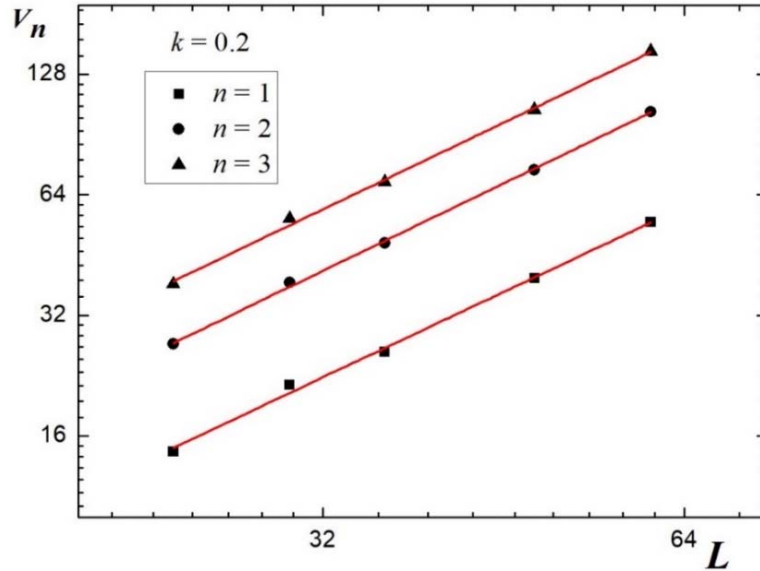


Рис. 3.38. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.2$ .

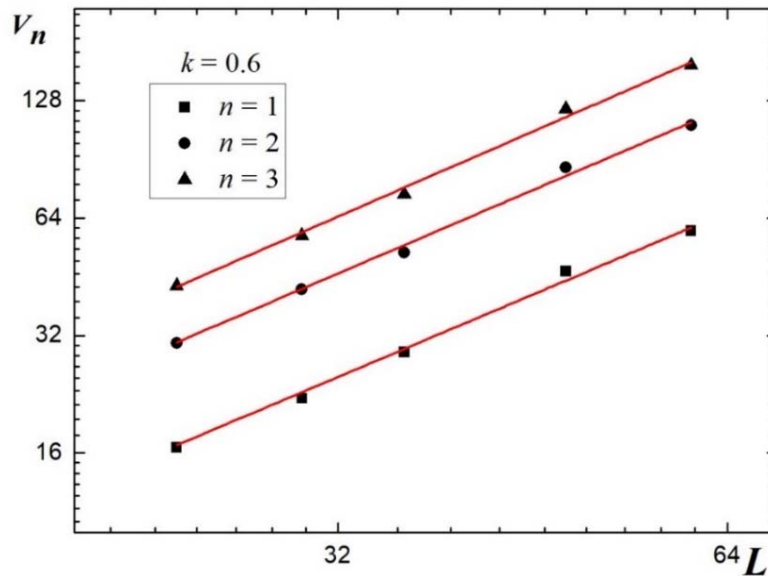


Рис. 3.39. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.6$ .

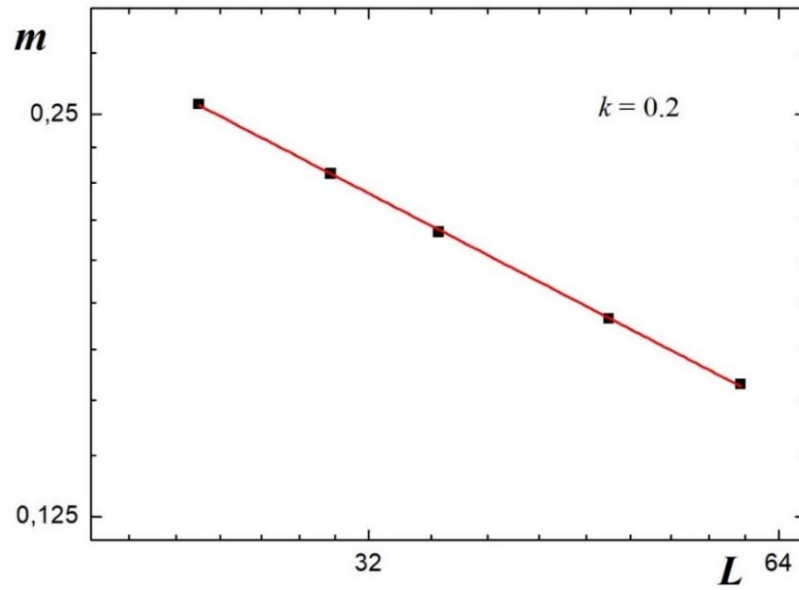


Рис. 3.40. Зависимость параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.2$ .

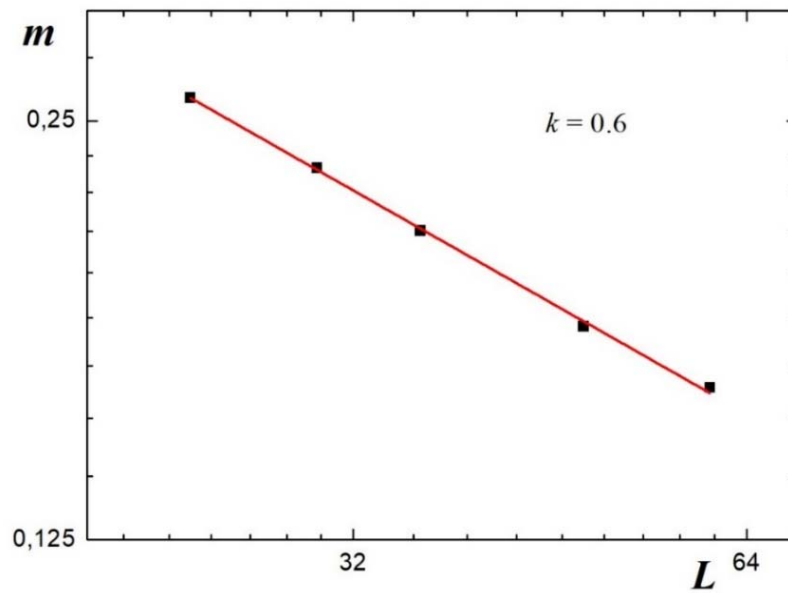


Рис. 3.41. Зависимость параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.6$ .

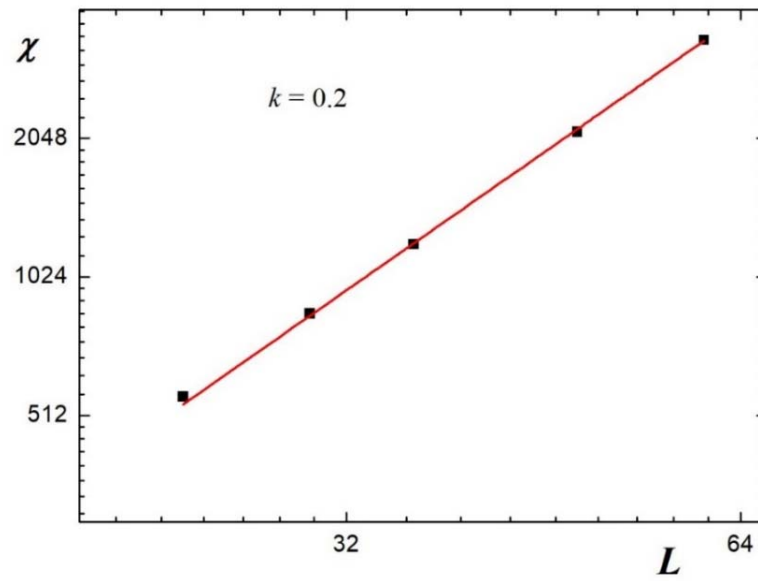


Рис. 3.42. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.2$ .

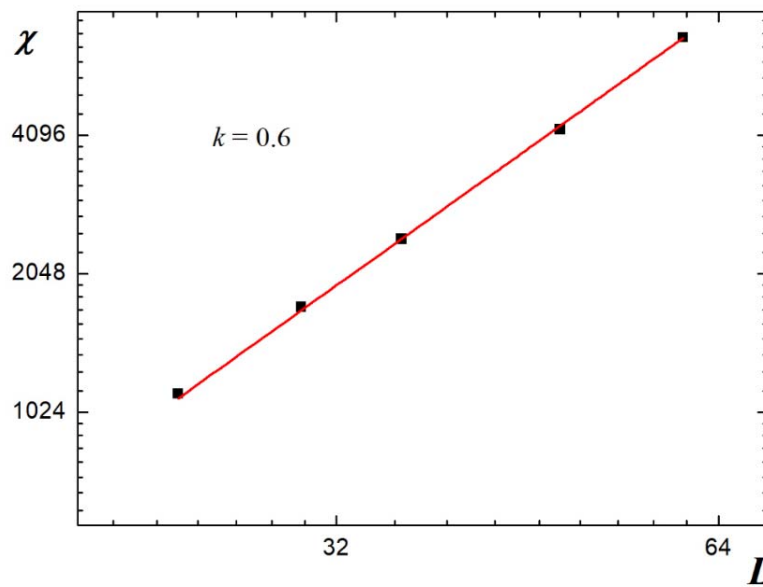


Рис. 3.43. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $k=0.6$ .

Отметим, что полученные нами значения критических индексов в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$ , в пределах погрешности совпадают с соответствующими значениями критических индексов для нефрустрированной модели Гейзенберга [199]. Это свидетельствует о принадлежности исследуемой нами модели к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная модель Гейзенберга на кубической решетке.

Как видно из таблицы 4 почти все значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$ , в пределах погрешности совпадают между собой. В этом интервале значений  $k$  система проявляет универсальное критическое поведение.

**Таблица 4.**

Значения критических индексов для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей на объемно-центрированной кубической решетке.

$k$	$T_N$	$\nu$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\eta$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
<b>0.0</b>	2.152(1)	0.70(2)	-0.13(1)	0.37(1)	1.39(1)	0.02(2)	2.0
<b>0.1</b>	1.873	0.70	-0.12	0.36	1.38	0.03	1.98
<b>0.2</b>	1.687	0.70	-0.13	0.37	1.39	0.02	2.0
<b>0.3</b>	1.494	0.70	-0.12	0.36	1.39	0.02	1.99
<b>0.4</b>	1.301	0.70	-0.12	0.36	1.38	0.03	1.98
<b>0.5</b>	1.094	0.70	-0.12	0.37	1.39	0.02	2.01
<b>0.6</b>	0.871	0.71	-0.13	0.37	1.38	0.03	1.99
Нефрустри- рованная модель Гейзенберга [199]	-	0.7112(5)	-0.1336(15)	0.3689(3)	1.3960(9)	0.0375(5)	-

### 3.4 Фазовые переходы в $3d$ антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей

Конкуренция обменных взаимодействий в магнитных материалах может привести к большому разнообразию магнитных упорядоченных состояний и ФП между ними.

Фрустрированные спиновые системы с конкурирующими антиферромагнитными обменными взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых ближайших соседей  $J_2$  более двух десятилетий были в центре интенсивных исследований в физике конденсированных сред как экспериментально, так и теоретически [21-23].

По сравнению с  $2d$  случаем,  $3d$  антиферромагнитная модель Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей [93-98], до сих пор довольно слабо изучена. Еще не совсем ясны термодинамика при низких температурах [90-92] и свойства основного состояния этих систем. Теоретические расчеты показывают, что в отличие от  $2d$  модели Гейзенберга с взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  на квадратной решетке ( $J_1$  и  $J_2$  - константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей),  $3d$  модель Гейзенберга с взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  на ОЦК решетке [94-96, 98] не имеет разупорядоченной спин-жидкостной фазы, а имеет прямой квантовый ФП первого рода из фазы Нееля в коллинеарную фазу при критическом значении  $(J_2/J_1)_c \approx 0.70$ . Однако, как показано в работе [97] увеличение  $J_2$  уменьшает намагниченность подрешеток в фазе Нееля, в конечном итоге нарушая дальний порядок при  $J_2/J_1 \approx 0.65$ . Также установлено [97], что при  $J_2/J_1 \approx 0.7$  возникает коллинеарная фаза. Предполагается, что возможно существование неизвестной области в интервале значений  $0.65 \leq J_2/J_1 \leq 0.7$ . Другими словами, использованный авторами в работе [97] метод функции Грина второго порядка в рамках приближения случайных фаз не может определить, происходит ли переход из фазы Нееля к квантовой спин-жидкой фазе, или фаза Нееля

непосредственно переходит в коллинеарную фазу. Таким образом, очевидно, что дальнейшие исследования неизвестной области при  $0.65 \leq J_2/J_1 \leq 0.7$  для ОЦК решетки должны быть выполнены с использованием более эффективных теоретических методов.

Для классической модели Гейзенберга с обменными взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  и модели Изинга с взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$  на ОЦК решетке расчет среднего поля [93] дает значение  $J_2/J_1=2/3$  для перехода систем в состояние полной фрустрации.

В работах [90, 91] рассмотрены термодинамические свойства квантовой антиферромагнитной модели Гейзенберга с учетом  $J_1$  и  $J_2$  со спиновой и одноионной анизотропией на ОЦК решетке. Спиновая и одноионная анизотропия могут иметь место во многих реальных магнитных материалах. Исследована область "слабой" фрустрации  $J_2/J_1 < 2/3$ , т.е. фаза Нееля, с помощью метода функции Грина второго порядка в рамках приближения случайных фаз. Анализируется роль и влияние спиновой и одноионной анизотропии на термодинамические величины, такие как намагниченность подрешеток, температура Нееля, свободная и внутренняя энергия, а также влияние фрустрации на кривой зависимости намагниченности подрешетки от температуры.

В работе [92] приведено теоретическое исследование фрустрированной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с антиферромагнитными и ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями  $J_1$  и  $J_2$ , с помощью алгоритма высокотемпературного разложения для структурного фактора. На рисунке 3.44 приведена зависимость критической температуры  $T_c$  от параметра фрустрации  $J_2$ . Приводится сравнение полученных результатов [92] с данными, полученными с помощью функции Грина второго порядка [200, 201], а также с данными, полученными путем анализа высокотемпературных разложений подрешеточной восприимчивости [139]. Все методы дают аналогичные результаты. Снижение критической температуры  $T_c$  происходит с увеличением  $J_2$ . По данным, полученным с помощью функции Грина второго порядка,  $T_c(J_2)$  переходит в нуль



при приближении  $J_2$  к критической точке. С другой стороны, существует заметная разница между данными функции Грина второго порядка и высокотемпературного разложения. Тогда как данные высокотемпературного разложения, полученные из структурного фактора, достаточно хорошо согласуются с данными, полученными из подрешеточной восприимчивости [139]. Из сопоставления результатов высокотемпературного разложения и метода МК для нефрустрированных систем [143] можно ожидать, что в области слабой фрустрации данные высокотемпературного разложения для  $T_c$  более точны, чем данные функции Грина второго порядка. Другой момент касается сравнения температуры Кюри  $T_c$  с температурой Нееля  $T_N$ . Для нефрустрированной модели Гейзенберга можно найти соотношение  $T_N > T_c$  [144, 148]. В отличие от результатов функции Грина второго порядка, обнаружено, что данные высокотемпературного разложения подчиняются этому соотношению во всей области вплоть до  $J_2 \sim 0.6$ .

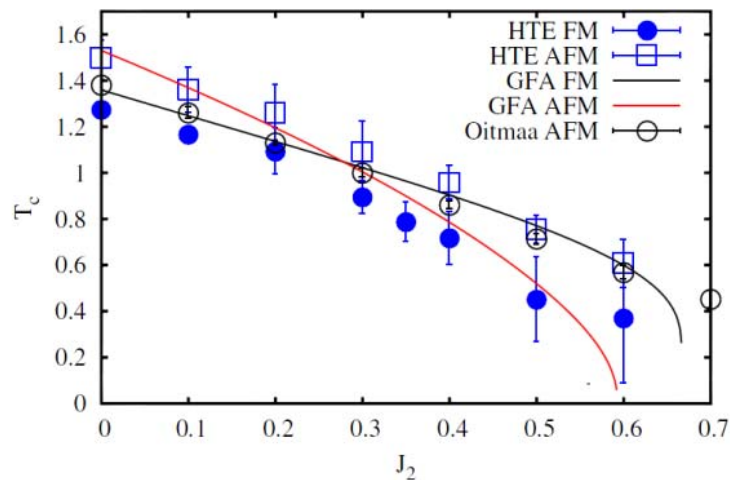


Рис.3.44. Фазовая диаграмма зависимости  $T_c$  от  $J_2$ .  
**HTE** – высокотемпературное разложение;  
**GFA** - функции Грина второго порядка.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения критического поведения фрустрированной системы на ОЦК решетке, и эти вопросы до сих пор остаются открытыми.

Для определения критической температуры  $T_N$ , мы использовали метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Методика определения  $T_N$  была описана нами ранее [181, 182].

На рисунке 3.45. приведена полученная нами фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $k$ . На диаграмме видно, что вблизи точки  $k=2/3$  пересекаются три различные фазы: AF1 – антиферромагнитная фаза 1-го типа, PM – парамагнитная фаза и AF2 – антиферромагнитная фаза 2-го типа. Переход из AF1 упорядочения к AF2 в данной модели обусловлен изменением структуры основного состояния. По мере приближения к точке, где сосуществуют три фазы, температура ФП смещается в сторону более низких температур. Диаграмма, полученная для этой модели, качественно совпадает с диаграммой  $3d$  модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей [189]. Результаты данной работы показывают, что в интервалах  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода. Более подробное исследование интервала  $2/3 \leq k \leq 0.75$  показало, что для случая  $k=2/3$  наблюдается ФП второго рода, а при  $2/3 < k \leq 0.75$  в системе реализуется ФП первого рода.

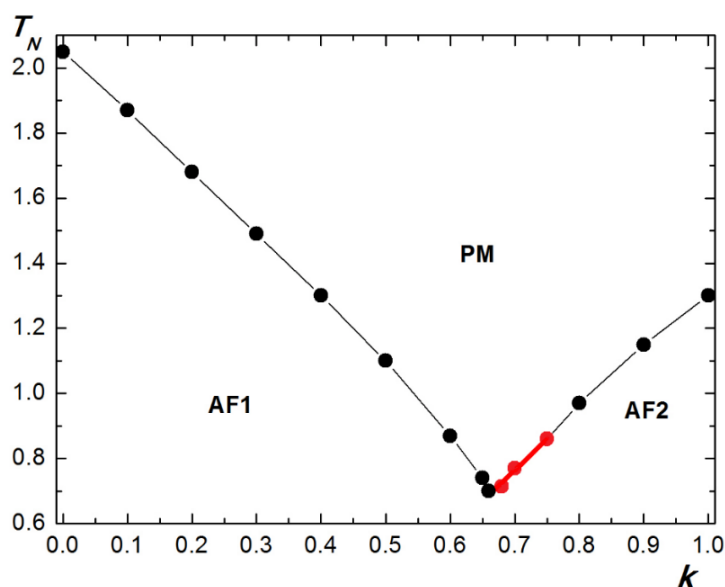


Рис.3.45. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный метод МК [100, 101]. Для эффективного использования этого метода, мы разделили весь диапазон энергии ( $U_{min}, U_{max}$ ) на  $r$  подинтервалов, где  $U_{min}^i$  это минимальная энергия подинтервала  $i=1,2,\dots,r$ ,  $U_{max}^i=U_{min}^{i+1}+2\Delta U$  это максимальная энергия подинтервала  $i$ .  $\Delta U$  мы брали достаточно большим, что обеспечило сглаживание границ между двумя подинтервалами. Далее нами были вычислены плотности состояний для каждого подинтервала ( $U_{min}^i, U_{max}^i$ ). Плотность состояний всей области получили, соединяя плотности состояний каждого подинтервала ( $U_{min}^i+\Delta U, U_{max}^i-\Delta U$ ) [100, 101].

На рисунках 3.46 и 3.47 приведены гистограммы распределения энергии для случаев  $k=0.2$  и  $k=0.8$ . Графики построены в критической точке ( $k=0.2 - T_N=1.687$ ,  $k=0.8 - T_N=0.975$ ) для решеток с размерами  $L=60$  и  $L=90$ . На рисунках мы наблюдаем один пик, что характерно для ФП второго рода. Аналогичные гистограммы были построены и для остальных значений  $k$  из интервала  $0.0 \leq k \leq 1.0$ .

На рисунке 3.48 представлены гистограммы распределения энергии для случая  $k=2/3$  с линейными размерами  $L=48$ . Графики построены в критической температуре  $T_N=0.702$  и вблизи нее. Видно, что для всех зависимостей вероятности от энергии  $P(U)$  для всех значений температур наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

На рисунках 3.49 и 3.50 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L=48$  для случая  $k=0.68$  и  $k=0.7$ . Графики построены в критической температуре. Наличие двойного максимума на кривых зависимости вероятности  $P$  от энергии  $U$  свидетельствует в пользу ФП первого рода. Такое же поведение наблюдается и для значения  $k=0.75$ . Таким образом, результаты нашего исследования показывают, что на фазовой диаграмме (рис. 3.45) наблюдается узкая область ( $2/3 < k < 0.75$ ), где реализуется ФП первого рода.

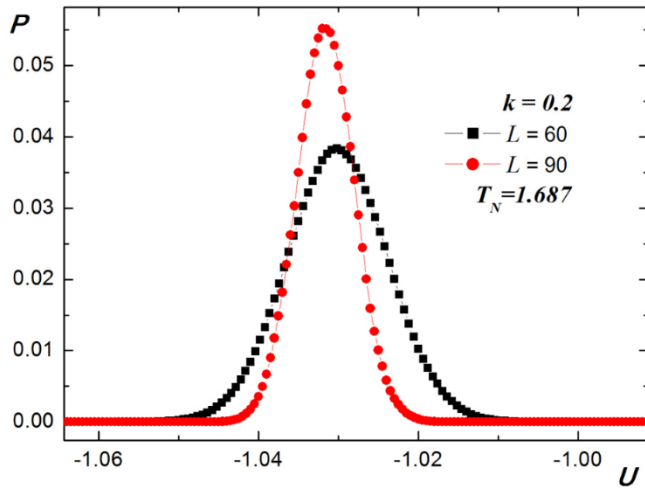


Рис. 3.46. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.2$ .

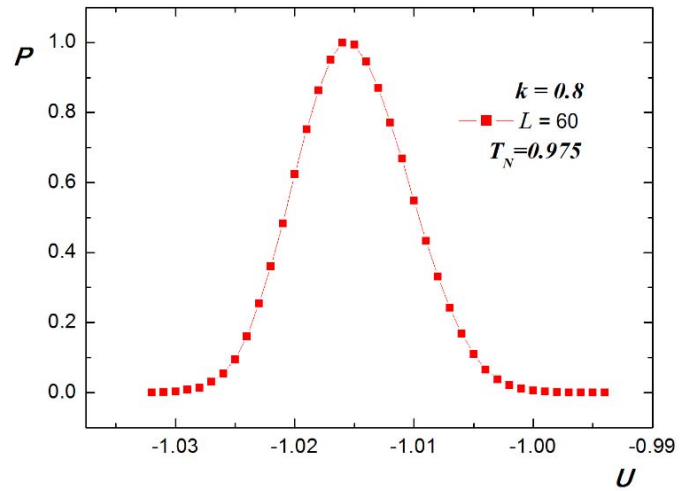


Рис. 3.47. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.8$ .

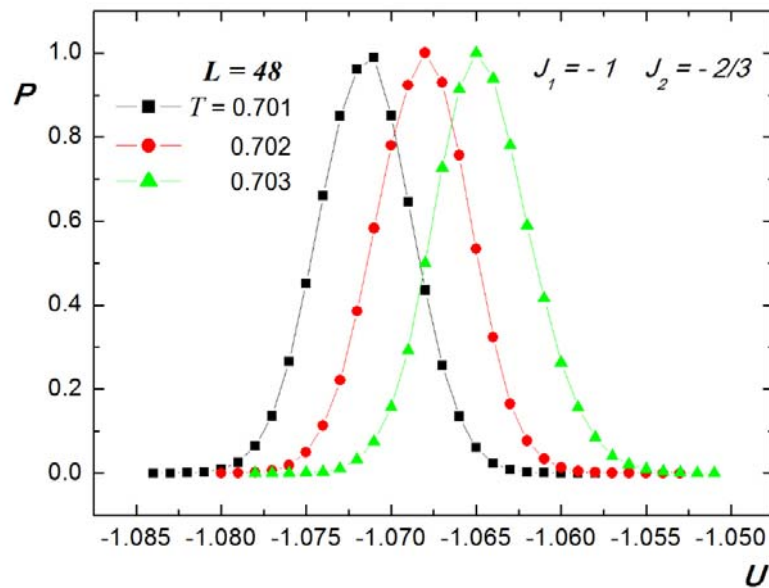


Рис. 3.48. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=2/3$ .

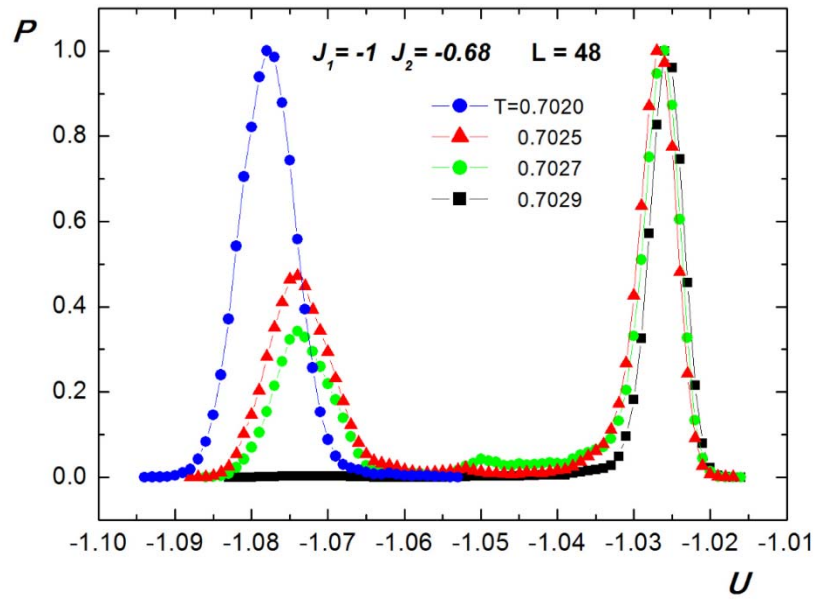


Рис. 3.49. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.68$ .

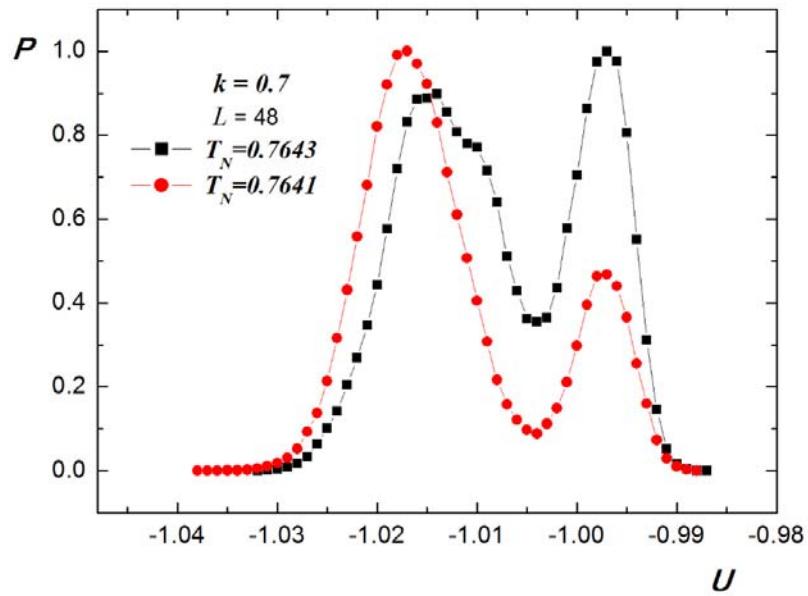


Рис. 3.50. Гистограмма распределения энергии для случая  $k=0.7$ .

Это подтверждается также данными на рисунке 3.51, где приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами  $L=48$  для случая  $k=0.7$ . Результаты приведены для двух температур:  $T_N=0.7643$  в точке ФП, а также выше и ниже критической температуры ( $T=0.770$  и  $T=0.763$ ). Как видно из графика, в точке ФП имеются два метастабильных энергетических уровня  $U_1=-1.0151$  и  $U_2=-0.9969$ . Система совершает случайные флуктуации около этих двух энергетических состояний. Энергия  $U_1$  соответствует первому максимуму вероятности  $P(U/N)$ , а  $U_2$  - второму максимуму на рисунке 3.50. Такое поведение характерно для ФП первого рода. Также на рисунке 3.37 мы наблюдаем, что кривые температурной зависимости теплоемкости для  $k=0.68$  и  $k=0.7$  характеризуются ярко выраженным спадом значения теплоемкости в области температур  $T \geq T_N$ .

Таким образом, анализ наших данных позволяет утверждать, что нами впервые на фазовой диаграмме обнаружена область  $2/3 < k \leq 0.75$ , где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Показано, что при значении  $k=2/3$  наблюдается ФП второго рода, и конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению фрустрации и сильному вырождению основного состояния.

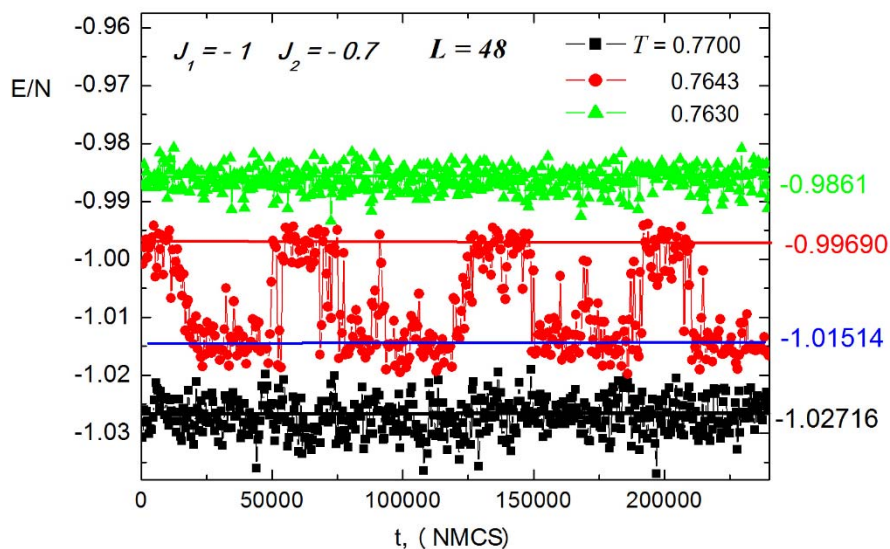


Рис. 3.51. Временная динамика внутренней энергии при различных температурах для  $k=0.7$  и  $L=48$ .

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Принимая во внимание очень активные теоретические и экспериментальные исследования в области фрустрированных магнетиков, численные методы расчета термодинамических свойств фрустрированных магнитных систем представляют огромный интерес.

В настоящей работе проведено исследование особенностей ФП, термодинамического и критического поведения спиновых систем с фрустрациями на основе высокоэффективного репличного обменного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода МК. С использованием этих алгоритмов исследованы статические критические свойства  $2d$  фрустрированной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей,  $3d$  модели Изинга и Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Вычислены температурные зависимости основных термодинамических величин для данных моделей. На основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны все основные статические критические индексы этих моделей.

Определение природы ФП, характера критического поведения и классов универсальности моделей с фрустрациями имеет огромный научный интерес.

Данная работа представляет собой дополнительный пример сложного поведения моделей с конкурирующими взаимодействиями. Кроме того, в работе продемонстрирована эффективность двух методов МК: репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау.

Основные оригинальные результаты диссертационной работы могут быть сформулированы следующим образом:

1. изучены особенности фазовых переходов фрустрированной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что для всех значений  $k$  в интервале  $0.0 \leq k \leq 1.0$  наблюдается ФП

- второго рода, кроме участка  $0.5 < k < 0.67$ , где реализуется ФП первого рода. При  $k=0.5$  система, вероятнее всего, переходит в частично фрустрированное состояние;
2. проведено исследование критических свойств фрустрированной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Рассчитаны статические магнитные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индекс Фишера  $\eta$ . Показано, что в исследуемой модели существуют две области, которые характеризуются различным набором критических индексов. Обнаружено, что класс универсальности критического поведения этой модели не меняется в пределах значения обменного взаимодействия  $0.0 \leq k < 0.5$ , а в интервале  $0.7 \leq k \leq 1.0$  наблюдается неуниверсальное критическое поведение;
  3. проведено исследование критических и термодинамических свойств  $3d$  антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Получены температурные зависимости основных термодинамических функций для этой модели. Рассчитаны статические магнитные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , параметра порядка  $\beta$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индекс Фишера  $\eta$ . Установлено, что класс универсальности критического поведения этой модели не меняется в пределах значения  $0.0 \leq k \leq 0.6$ . В интервале  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдается неуниверсальное критическое поведение;
  4. построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $k$ . Показано, что для всех значений  $k$  в интервалах  $0.0 \leq k \leq 2/3$  и  $0.75 < k \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода. Впервые, на диаграмме обнаружена узкая область  $2/3 < k \leq 0.75$ , где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Показано, что при значении  $k=2/3$  наблюдается ФП



второго рода и конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению полностью фрустрированного состояния. Впервые получены все возможные магнитные структуры основного состояния для различных соотношений обменных взаимодействий  $k$ . Показано, что в системе возможно 6 различных упорядочений в основном состоянии;

5. проведены исследования  $3d$  антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей. Рассчитаны все основные магнитные критические индексы. Обнаружено, что в интервале  $0.0 < k \leq 0.6$  система проявляет универсальное критическое поведение;
6. построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что для всех значений  $k$  в интервалах  $0.0 \leq k \leq 2/3$  и  $0.75 < k \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода. На диаграмме обнаружена область  $2/3 < k \leq 0.75$ , где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Показано, что при значении  $k=2/3$  наблюдается ФП второго рода и конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению полностью фрустрированного состояния;
7. разработан комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать природу фазовых переходов и статические критические свойства фрустрированных спиновых моделей.

Таким образом, полученные при выполнении данной работы результаты, использованные алгоритмы, приемы и способы расчета критических параметров создают надежную основу для исследования методами вычислительной физики спиновых моделей с фрустрациями.

---

---

В заключении хотелось бы выразить глубокую благодарность моему научному руководителю член-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук, профессору **Муртазаеву Акаю Курбановичу**, научному консультанту кандидату физико-математических наук **Рамазанову Магомедшейху Курбановичу** и кандидату физико-математических наук **Магомедову Магомеду Алиевичу** за предложенную тему исследования, постоянное внимание и благожелательный интерес к работе, полезные обсуждения результатов и большую помощь, оказанную при выполнении настоящей работы.

Автор также глубоко признателен всем сотрудникам лаборатории «Вычислительной физики и физики фазовых переходов», принимавшим активное участие в обсуждении результатов работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Сосин С.С., Прозорова Л.А., Смирнов А.И. Новые магнитные состояния в кристаллах // УФН. – 2005. – Т. 175, №1. - С. 92–99.
2. Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком // УФН. – 1995. – Т. 165, № 5. – С. 481–528.
3. Коршунов С.Е. Фазовые переходы в двумерных системах с непрерывным вырождением // УФН. – 2006. – Т. 176. – С. 233–274.
4. Малеев С.В. Рассеяние поляризованных нейтронов в магнетиках // УФН. – 2002. – Т. 17, №6. – С. 617–646.
5. Tisser M., Delamotte B., Mouhanna D. Frustrated Heisenberg Magnets: A Nonperturbative Approach // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 84, no. 22. - P. 5208-5211.
6. Calabrese P., Parruccini P., Pelissetto A., Vicari E. Critical behavior of  $O(2) \times O(N)$  symmetric models // Physical Review B. – 2004. – Vol. 70. - P. 174439.
7. Pelissetto A., Rossi P., Vicari E. Critical behavior of frustrated spin models with noncollinear order // Physical Review B. – 2001. – Vol. 63. - P. 140414(R).
8. Diep H.T. Theoretical methods for understanding advanced magnetic materials: The case of frustrated thin films Journal of Science: Advanced Materials and Devices. – 2016. – P. 31-44.
9. Moran-Lopez J.L., Aguilera-Granja F., Sanchez J.M. First-order phase transitions in the Ising square lattice with first and second-neighbor interactions // Physical Review B. – 1993. – Vol. 48, no. 5. - P. 3519-3522.
10. Moran-Lopez J.L., Aguilera-Granja F., Sanchez J.M. Phase transitions in king square antiferromagnets with first and second-neighbour interactions // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1994. – Vol. 6. – P. 9759-9772.
11. Lopez-Sandoval E., Moran-Lopez J.L., Aguilera-Granja F. Cluster variation method and Monte Carlo simulations in Ising square antiferromagnets // Solid State Communications. - 1999. – Vol. 112. – P. 437-411.

12. Buzano C., Pretti M. Cluster variation approach to the Ising square lattice with two- and four-spin interactions // *Physical Review B*. – 1997. – Vol. 56, no. 2. - P. 636-644
13. Rosner H., Singh R.R.P., Zheng W.H., Oitmaa J., Pickett W.E. High-temperature expansions for the  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg models: Applications to ab initio calculated models for  $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$  and  $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$  // *Physical Review B*. – 2003. - Vol. 67. – P. 014416.
14. Sirker J., Weihong Z., Sushkov O.P., Oitmaa J.  $J_1$ - $J_2$  model: First-order phase transition versus deconfinement of spinons // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73. – P. 184420.
15. Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M., Hosono H. Iron-Based Layered Superconductor  $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$  ( $x=0.05$ - $0.12$ ) with  $T_c = 26$  K // *Journal of the American Chemical Society*. – 2008. - Vol. 130, no.11. – P. 3296-3297.
16. Wen H.H., Mu G., Fang L., Yang H., Zhu X. Superconductivity at 25 K in hole-doped  $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{OFeAs}$  // *Europhysics Letters*. – 2008. – Vol. 82. - P. 17009.
17. Cruz C., Huang Q., Lynn J.W., Li J., Ratcliff W., Zarestky J.L., Mook G.F., Chen H.A., Luo J.L., Wang N.L., Dai P. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered  $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$  systems // *Nature*. – 2008. – Vol. 453. – P. 899-902.
18. Chen G.F., Li Z., Wu D., Li G., Hu W.Z., Dong J., Zheng P., Luo J.L., Wang N.L. Superconductivity at 41 K and Its Competition with Spin-Density-Wave Instability in Layered  $\text{CeO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$  // *Physical Review Letters*. – 2008. – Vol. 100. – P. 247002.
19. Rotter M., Tegel M., Johrendt D. Superconductivity at 38 K in the Iron Arsenide  $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$  // *Physical Review Letters*. – 2008. – Vol. 101. – P. 107006.
20. Landau D.P., Binder K. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics // Cambridge University Press. – 2000. - 384 p.
21. Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory, in: Lacroix C., Mendels, F. Mila (Eds.), - Series in Solid-State Sciences 164, Springer, Berlin, 2011.

22. Sachdev S. Quantum Phase Transitions. - Cambridge University Press, 2001.
23. Diep H.T. Frustrated Spin Systems. - World Scientific Publishing, 2004.
24. Паташинский А.З., Покровский В.А. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 380 с.
25. Паташинский А.З., Покровский В.А. Метод ренормализационной группы в теории фазовых переходов // УФН. – 1977. – Т. 121, вып. 1. – С. 55-96.
26. Ма Ш. Современная теория критических явлений // Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. – М.: Мир, 1980. – 298 с.
27. Вильсон К., Когут Д. Ренормализационная группа и  $\epsilon$  – разложение // Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. В.К. Федянина. – М.: Мир, 1975. – 256 с.
28. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления // Пер. с англ. А.И. Мицека, Т.С. Шубиной; Под ред. С.В. Вонсовского. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
29. Wilson K.G. Renormalization group and critical phenomena. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture // Physical Review B. – 1971. – Vol. 4, no. 9. – P. 3174-3183.
30. Amit D.J. Field Theory, Renormalization Group and Critical Phenomena. - World Scientific, 1984.
31. Zinn-Justin J. Quantum field theory and critical phenomena. - Oxford University Press, 2002.
32. Loison D., Sokolov A. I., Delamotte B., Antonenko S. A., Schotte K. D., Diep H. T. Critical behavior of frustrated systems: Monte Carlo simulations versus renormalization group // JETP Letters. – 2000. – Vol. 72, no. 6. – P. 487–492.
33. Aoyama K., Kawamura H. Spin-lattice-coupled order in Heisenberg antiferromagnets on the pyrochlore lattice // arXiv:1605.01080v2 [cond-mat.str-el] 2016.
34. Mailhot A., Plumer M.L., Caille A. Finite-size scaling of the frustrated model on a hexagonal lattice // Physical Review B. – 1994-II. – Vol. 50, no. 10. – P. 6854-6858.

35. Kawamura H., Watanabe K., Shimokawa T. Quantum Spin-Liquid Behavior in the Spin-1/2 Random-Bond Heisenberg Antiferromagnet on the Kagome // Journal of the Physical Society of Japan. – 2014. – Vol. 83. – P. 103704.
36. Shimokawa T., Kawamura H. Finite-temperature crossover phenomenon in the  $S=1/2$  antiferromagnetic Heisenberg model on the kagome lattice // arXiv:1607.06205v1 [cond-mat.str-el] 2016.
37. Фишер М. Физика критического состояния // Пер. с англ. М.Ш. Гитермана. – М.: Мир, 1968. – 221 с.
38. Гинзбург В.Л. О физике и астрофизике. – М.: Наука, 1985. – 400 с.
39. Ising E. Beitradzurtheorie des ferromagnetismus // Z. Physik. – 1925. – Vol. 31, no. 3. – P. 253-258.
40. Onsager L. Crystal statistics: A two- dimensional model with an order-disorder transitions // Physical Review. – 1944. – Vol. 65. – P.117-149.
41. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике // Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
42. Diep H.T. Theoretical methods for understanding advanced magnetic materials: The case of frustrated thin films // Journal of Science: Advanced Materials and Devices. – 2016. – vol. 1. – P. 31-44.
43. Камиллов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. – 1999. – Т. 169, №7. – С. 773–795.
44. Binder K., Luijten E. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models // Phys. Reports. – 2001. – V. 344. – P. 179-253.
45. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena // Physica A. – 1994. – V. 205. – P. 41 – 64.
46. Peczak P., Alan M., Ferrenberg A.M., Landau D.P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // Physical Review B. – 1991. – Vol. 43, no. 7. – P. 6087-6093.

47. Kalz A. Phase diagrams of two-dimensional frustrated spin systems – Berlin, 2012.
48. Swendsen R.H., Wang J.Sh. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // *Physical Review Letters*. – 1987. – Vol. 58, no. 2. – P. 86-88.
49. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems // *Physics Letters*. – 1989. – Vol. 62, no. 4. – P. 361-364.
50. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions // *Physical Review Letters*. – 1988. – Vol. 61, no. 23. – P. 2635-2638.
51. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. Optimized Monte Carlo data analysis // *Physical Review Letters*. – 1989. - Vol. 63, no. 12. – P. 1195-1198.
52. Munger E.P., Novotny M.A. Reweighting in Monte Carlo and Monte Carlo renormalisation-group studies // *Physical Review B*. - 1991. – Vol. 43, no. 7. – P. 5773-5783.
53. Ferdinand A.E., Fisher M.E. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice // *Physical Review*. – 1969. – Vol. 185, no. 2 – P. 832-846.
54. Fisher M.E., Barber M.N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region // *Physical Review Letters*. – 1972. – Vol. 28, no. 23. – P. 1516-1519.
55. Фаворский И.А. Свойства малых сферических частиц с дипольным взаимодействием // *ФТТ*. – 1980. - Т. 22, вып. 7. – С. 2222-2224.
56. Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированных моделей Гейзенберга методами Монте-Карло: Диссертация канд. физ.-мат. наук ИФ им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН – 2012. – 156с.
57. Gilbert I. et al. Emergent reduced dimensionality by vertex frustration in artificial spin ice // *Nature Physics*. – 2015. – P. 162-165/
58. Harris M. J. et al. Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore  $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  // *Physical Review Letters*. – 1997. – Vol. 79, no. 13. – P. 2554.
59. Snyder J. et al. How ‘spin ice’ freezes // *Nature*. – 2001. – Vol. 413, no. 6851. – P. 48-51.

60. Gardner J. S. et al. Dynamic frustrated magnetism in  $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  at 50 mK // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 68, no. 18. – P. 180401.
61. Shevchenko Y. A., Nefedev K. V., Makarov A. G. The lack of frustrations and excitations in the ground state of artificial spin ice on large square lattice // *Spinphysics, Spin chemistry and Spin technology 2015 conference proceedings*. - 2015. – P. 126.
62. Mirebeau I. et al. Investigation of magnetic fluctuations in  $\text{Tb}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  ordered spin ice by high-resolution energy-resolved neutron scattering // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 78, no. 17. – P. 174416.
63. Möller G., Moessner R. Artificial square ice and related dipolar nanoarrays // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 96, no. 23. – P. 237202.
64. Bogdanov A., Hubert A. Thermodynamically Stable Magnetic Vortex States in Magnetic Crystals // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. - 1994. – Vol. 138. – P. 255.
65. Bogdanov A., Hubert A. The Properties of Isolated Magnetic Vortices // *Phys. Status Solidi (b)*. – 1994. – Vol. 186. - P. 527.
66. Kang, W. et al. Compact modeling and evaluation of magnetic skyrmion-based racetrack memory // *IEEE Transactions on Electron Devices*. – 2017. – Vol. 64(3). - P. 1060-1068.
67. Bauer A. et al. Symmetry breaking, slow relaxation dynamics, and topological defects at the field-induced helix reorientation in  $\text{MnSi}$  // *Physical Review B*. - 2017. – Vol. 95. – P. 024429.
68. Moreau-Luchaire C. et al. Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature // *Nature nanotechnology*. – 2016. – Vol. 11(5). – P. 444-448.
69. Wieser R., Shindou R., Xie X.C. Manipulation of magnetic skyrmions with a scanning tunneling microscope // *Physical Review B*. – 2017. – Vol. 95(6). – P. 064417.



70. Wiesendanger R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics // *Nature Reviews Materials*. – 2016. – Vol. 1. – P. 1604
71. Okamura Y., Kagawa F., Seki S., Tokura Y. Transition to and from the skyrmion lattice phase by electric fields in a magnetoelectric compound // *Nature Communications*. – 2016. – Vol. 7. – P. 12669.
72. Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике // Пер. с англ. В.Н. Новикова, К.К. Сабельфельда; Под. ред. Г.И. Марчука, Г.А. Михайлова. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
73. Holm C., Janke W. Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study // *Physical Review*. – 1993-I. – Vol. 48, no. 2. – P. 936-950.
74. Nonomura Y. New Quantum Monte Carlo Approach to Ground-State Phase Transition in Quantum Spin Systems // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1998. - Vol. 67, no. 1. – P. 5-7.
75. Крокстон К. Физика жидкого состояния // Пер. с англ. А.Г. Башкирова, И.В. Вдовиченко; Под ред. А.И. Осипова. – М.: Мир, 1978. – 400 с.
76. Вуд В.В. Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло // *Физика простых жидкостей* // Под ред. Х.М. Темперли, Д.С. Роулинсон, Т.С. Рашбрука. – М.: Мир, 1978.
77. Ермаков С. М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. – М.: Мир, 1982. – 292 с.
78. Rosana A. dos Anjos, Viana J. R., Sousa J. R. Phase diagram of the Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice // *Physics Letters A*. – 2008. – Vol. 372. – P. 1180–1184.
79. Malakisa A., Kalozoumis P., Tyraskis N. Monte Carlo studies of the square Ising model with next-nearest-neighbor interactions // *European Physical Journal B*. – 2006. – Vol. 50. – P. 63–67.

80. Junqi Yin and Landau D. P. Phase diagram and critical behavior of the square-lattice Ising model with competing nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions // *Physical Review E*. – 2009. – Vol. 80. – P. 051117.
81. Binder K., Landau D. P. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions // *Physical Review B*. – 1980. – Vol. 21, no. 5. – P. 1941-1962.
82. Kalz A., Honecker A., Moliner M. Analysis of the phase transition for the Ising model on the frustrated square lattice // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 84. – P. 174407.
83. Kalz A., Honecker A. Location of the Potts-critical end point in the frustrated Ising model on the square lattice // *Physical Review B*. – 2012. – Vol. 86. – P. 134410.
84. Jin S., Sen A., Guo. W., Sandvik A.W. Sandvik Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 87. – P. 144406.
85. Kalz A., Chitov G.Y. Topological floating phase in a spatially anisotropic frustrated Ising model // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 88. – P. 014415.
86. Jin S., Sen A., Sandvik A.W. Ashkin-Teller Criticality and pseudo-first-order behavior in a frustrated Ising model on the square lattice // *Physical Review Letters*. – 2012. – Vol. 108. – P. 045702.
87. Kalz A., Honecker A., Fuchs S., Pruschke T. Phase diagram of the Ising square lattice with competing interactions // *European Physical Journal B*. – 2008. – Vol. 65. - P. 533–537.
88. Azaria P., Diep H.T., Giacomini H. First-order transition, multicriticality and re-entrance in a b.c.c. lattice with Ising spins // *Europhysics Letters*. – 1989. – Vol. 9 (8). – P. 755-760.
89. Banavar J.R., Jasnow D., Landau D.P. Fluctuation-induced first-order transition in a bcc Ising model with competing interactions // *Physical Review B*. – 1979. – Vol. 20, no. 9. – P. 3820-3827.

90. Bin-Zhou Mi Thermodynamic properties of frustrated arbitrary spin-S  $J_1$ - $J_2$  quantum Heisenberg antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation // *Solid State Communications*. – 2016. – Vol. 239. – P. 20–26.
91. Bin-Zhou Mi Magnetism and thermodynamics of the anisotropic frustrated spin-1 Heisenberg antiferromagnet on a body-centered cubic lattice // *Solid State Communications*. – 2017. – Vol. 251. – P. 79–87.
92. Richter J., Meuller P., Lohmann A., Schmidt H-J. High-temperature expansion for frustrated magnets: Application to the  $J_1$ - $J_2$  model on the BCC lattice // *Physics Procedia Volume*. – 2015. – Vol. 75. – P. 813–820.
93. Smart J.S. *Effective field theories of Magnetism*. – Saunders, Philadelphia, 1966.
94. Schmidt R., Schulenburg J., Richter J. Spin -1/2  $J_1$ - $J_2$  model on the body-centered cubic lattice // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – P. 224406.
95. Majumdar K., Datta T. Non-linear spin wave theory results for the frustrated  $S = 1/2$  Heisenberg antiferromagnet on a body-centered cubic lattice // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – Vol. 21. – P. 406004.
96. Oitmaa J., Zheng W. Phase diagram of the bcc  $S=1/2$  Heisenberg antiferromagnet with first and second neighbor exchange // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – P. 064416.
97. Pantić M.R., Darko V. Kapor, Slobodan M. Radošević, Petar M. Mali Phase diagram of spin -1/2 quantum Heisenberg  $J_1$ - $J_2$  antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation // *Solid State Communications*. – 2014. – Vol. 182. – P. 55–58.
98. Farnell D. J., Götze O., Richter J. Ground-state ordering of the  $J_1$ -  $J_2$  model on the simple cubic and body-centered cubic lattices // *Physical Review B*. – 2016. - Vol. 93 - P. 235123.
99. Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Generalized-Ensemble Algorithms for Molecular Simulations of Biopolimers // *Peptide Science*. – 2001. – Vol. 60. – P. 96. - preprint cond-mat/0012021.

100. Wang F., Landau D.P. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram // *Physical Review E*. – 2001. – Vol. 64. – P. 056101.
101. Wang F., Landau D.P. Efficient, Multiple-Range random walk algorithm to calculate the density of states // *Physical Review Letters*. – 2001. – Vol. 86, no. 10. – P. 2050-2053.
102. Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A. Thermodynamic, critical properties and phase transitions of the Ising model on a square lattice with competing interactions // *Solid State Communications*. – 2016. – Vol. 233. - P. 35-40.
103. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Касан-Оглы Ф.А., Бадиев М.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // *ЖЭТФ*. – 2013. - Т. 144, вып. 6(12). – С. 1239-1245.
104. Щур Л.Н. Алгоритм Ванга-Ландау: случайное блуждание по спектру энергии, в книге "Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования" // Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2014. - С. 160-166.
105. Zhou C., Schulthess T.C., Torbrügge S., Landau D.P. Wang-Landau algorithm for continuous models and joint density of states // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 96. – P. 120201.
106. Metropolis N., Rosenbluth W., Rosenbluth N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines // *The Journal of Chemical Physics* – 1953. – Vol. 21, no. 6. – P. 1087-1092.
107. Wood W.W., Parker F.R. Monte-Carlo equation of state of molecules interactions with the Lenard-Jones potential. I: A supercritical isotherm at about twice the critical temperature // *The Journal of Chemical Physics*. – 1957. – Vol. 27, no. 3. – P. 720-733.
108. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю. Н. Статистическая механика магнитоупорядочных систем. – М.: Наука, 1987. – 264 с.

109. Metropolis N. [et al.] Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // The Journal of Chemical Physics. – 1953. – Vol. 21, no. 6. – P. 1087–1092.
110. Kalyan M.S. [et al.] Joint Density of States Calculation Employing Wang–Landau Algorithm // Journal of Statistical Physics. – 2016. – Vol. 163, no. 1. – P. 197–209.
111. Loison D. Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians  $H = J \sum (S_i S_j)^3$  // Physics Letters A. – 1999. – V. 257. – P. 83-87.
112. Sweeny M. Monte Carlo study of weighted percolation clusters relevant to the Potts models // Physical Review – 1983-I. – Vol. 27. – P. 4445.
113. Goodman J., Sokal A. D. Multigrid Monte Carlo method for lattice field theories // Physical Review Letters. – 1986. – Vol. 56, no. 10. – P. 1015-1018.
114. Creutz M. Overrelaxation and Monte-Carlo simulation // Physical Review D. – 1987. – Vol. 36, no.2. – P. 515-519.
115. Schmidt K. E. Using renormalization-group ideas in Monte Carlo sampling // Physical Review Letters. – 1983. – Vol. 51, no. 24. – P. 2175-2178.
116. Swendsen R.H., Wang J.-S. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses // Physical Review Letters. – 1986. – Vol. 57, no. 21. – P. 2607-2609.
117. Hukushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations // Journal of the Physical Society of Japan. – 1996. – Vol. 65, no. 6. – P. 1604-1608.
118. Wang J-S., Swendsen R.H. Low-temperature properties of the  $\pm J$  Ising spin glass in two dimensions // Physical Review B. – 1988. – Vol. 38, no. 7. – P. 4840-4844.
119. Wang J-S., Swendsen R.H. Monte Carlo and high-temperature-expansion calculations of a spin-glass effective hamiltonial // Physical Review B. – 1988. – Vol. 38, no. 13. – P. 9086-9092.
120. Hansmann U.H.E., Okamoto Y. Monte Carlo simulations in generalized ensemble: Multicanonical algorithm versus simulated tempering // Physical Review E. – 1996. – Vol. 54, no.11. – P. 5863-5865.
121. Belardinelli R., Pereyra V. Fast algorithm to calculate density of states // Physical Review E. – 2007. – Vol. 75, no. 4. – P. 046701.

122. Landau D., Tsai S.-H., Exler M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // *American Journal of Physics*. – 2004. – Vol. 72, no. 10. – P. 1294–1302.
123. Силантьева И.А., Воронцов-Вельяминов П.Н. Расчет плотности состояний и термических свойств полимерных цепей и звезд на решетке методом Монте-Карло с использованием алгоритма Ванга–Ландау // *вычислительные методы и программирование*. - 2011. - Т. 12, № 4. - С. 397-408.
124. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A. Monte-Carlo investigation of critical phenomena in models of real magnetics with crossovers // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147/1-2. – P. 447-450.
125. Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Муртазаев А.К. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // *ЖЭТФ*. – 2016. – Т.149, вып. 2. – С. 357-366.
126. Shell M.S., Debenedetti P.G., Panagiotopoulos A.Z. Generalization of the Wang-Landau method for off-lattice simulations // *Physical Review E*. - 2002. - Vol. 66(5). – P. 56703.
127. Zhou C., Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm // *Physical Review E*. - 2005. - Vol. 72(2). - P. 025701.
128. Fosdik L.D. Studies of Monte Carlo method applied to the Ising lattice problem // *Bull. Amer. Phys. Soc.* – 1957. – Vol. 2, no. 4. – P. 239.
129. Landau D.P. Finite-size behavior of the Ising square lattice // *Physical Review B*. – 1976. – Vol.13, no.7. – P. 2997 – 3011.
130. Landau D.P. Finite-size behavior of the simple-cubic Ising lattice // *Physical Review B*. – 1976. – Vol.14, no.1. – P. 255 – 262.
131. Landau D.P. Critical behavior of Ising antiferromagnet in a magnetic field // *Physical Review B*. – 1977. – Vol.16, no.9. – P. 4164 – 4170.
132. Binder K. Thermodynamics of finite spin systems // *Phys. Stat. Sol. B*. – 1971. – Vol.46, no. 2. – P. 567 – 577.

133. Lundow P.H., Markstrom K., Rosengren A. The Ising model for the bcc, fcc and diamond lattices: A comparison // *Philosophical Magazine*. 2009. – Vol. 89, no. 22-24. – P. 2009-2042.
134. Bethe H. Theorie der Metalle. Erster Teil. Eigenwerte und Eigenfunktionen der lineären atomischen Kette // *Z. Physik*. – 1931. – Vol. 71. – P. 205-226.
135. Binder K., Rouch H., Wildpaner V. Monte Carlo calculation of the magnetization superparamagnetic particles // *Physics and Chemistry Solids*. – 1970. – Vol. 31. – P. 391 – 397.
136. Фаворский И.А., Воронцов-Вельяминов П.Н., Рощиненко О.М., Громова Н.Б. Моделирование магнитных кластеров методом Монте-Карло. – Киев: Препринт ИТФ АН УССР, ИТФ-85-93Р, 1985. – С. 23.
137. Dagotto E., Moreo A. Phase Diagram of the Frustrated Spin- 2 Heisenberg Antiferromagnet in Two Dimensions // *Physical Review Letters*. – 1989. – Vol. 63, no. 19. – P. 2148-2151.
138. Manousakis E. The spin –  $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides // *Review of Modern Physics*. - 1991. – Vol. 63. – С. 1-62.
139. Richter J., Ivanov N.B., Retzlaff K. On the violation of Marshall-Peierls sign rule in the frustrated  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg antiferromagnet // *Europhysics Letters*. – 1994. – Vol. 25. – 545-550.
140. Capriotti L., Sorella S. Spontaneous plaquette dimerization in the  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model // *Physical Review Letters*. – 2000. - Vol. 84, no. 14. – P. 3173–3176.
141. Krüger F., Scheidl S. Frustrated Heisenberg antiferromagnets: fluctuation-induced first order vs. deconfined quantum criticality // *Europhysics Letters*. -2006. – Vol. 74(5). – P. 896-902.
142. Richter J., Zinke R., Farnell D.J.J. The spin -1/2 square-lattice  $J_1$ - $J_2$  model: the spin-gap issue // *European Physical Journal B*. – 2015. – Vol. 88. – P. 2.

143. Cysne T.P., Silva Neto M.B. Magnetic quantum phase transitions of the two-dimensional antiferromagnetic  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model // *Europhysics Letters*. – 2015. – Vol. 112. – P. 47002.
144. Farias C., Thomas C., Pépin C., Ferraz A., Lacroix C., Burdin S. Spin liquid versus long-range magnetic order in the frustrated body-centered-tetragonal lattice // *Physical Review B*. – 2016. - Vol. 94. – P. 134420.
145. Canals B., Lacroix C. Pyrochlore Antiferromagnet: A three-dimensional quantum spin liquid// *Physical Review Letters*. – 1998. –Vol. 80, no. 13. – P. 2933-2936.
146. Koga A., Kawakami N. Frustrated Heisenberg antiferromagnet on the pyrochlore lattice // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 63. – P. 144432.
147. Villain J. La Structure des substances magnetiques // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1959. – Vol. 11. – P. 303-309.
148. Diep H.T. Magnetic transitions in helitagnets // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 39. – P. 397-404.
149. Holt M., Sushkov O.P., Stanek D., Uhrig G.S. Three-dimensional generalization of the  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model on a square lattice and role of the interlayer coupling  $J_c$  // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 83. – P. 144528.
150. Rojas O., Hamer C.J., Oitmaa J. A frustrated three-dimensional antiferromagnet: stacked  $J_1$ - $J_2$  layers // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2011. – Vol. 23. – P. 416001.
151. Fan Z., Jie Q. Ordered magnetic phase in a frustrated spin –  $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnetic stacked square lattice // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 89. – P. 054418.
152. Кассан-оглы Ф.А., Филиппов Б.Н. Фрустрации в магнитных системах низкой размерности // *Известия РАН. Серия физическая*. – 2010. - Том 74, № 10. – С. 1513-1515.
153. Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Кассан-Оглы Ф.А., Прошкин А.И. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на



- треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // ЖЭТФ. – 2016. - Том 149, вып. 2. - С. 357–366.
154. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. – 2017. – Т. 106. – С. 72-77.
155. Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния // УФН. – 1993. – 163, № 6. – С. 1–37.
156. Toulouse G. Theory of the frustration effect in spin glasses // Communications Physics. – 1977. – Vol. 2, no.4. – P.115-119.
157. Binder K., Young A.P. Spin glass: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions // Review of modern physics. – 1986. –Vol. 58, no.4. – P.801-976.
158. Parisi G. A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin glasses // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1980. – Vol. 13, no. 4. – P. 115-121.
159. Parisi G. Order Parameter for Spin-Glasses // Physical Review Letters. – 1983. Vol. 50, no. 24. – P. 1946-1948.
160. Moessner P.R. Magnets with strong geometric frustration // arXiv:cond-mat/0010301v1 [cond-mat.stat-mech] 2000.
161. Moessner R., Ramirez A. Geometrical frustration // Physics Today. – 2006. – P. 24-28.
162. Ramirez A.P. Strongly geometrically frustrated magnets // Annual Review of Materials SCI. - 1994. – vol. 24. – P. 453-480.
163. Barber M. N. Finite-size scaling. In: Phase transitions and critical phenomena // Academic press. – 1983. – Vol. 8. – P. 1.
164. Privman V., Fisher M. E. Universal critical amplitudes in finite-size scaling // Physical Review B. – 1984. – Vol. 30, no. 1. – P. 322-327.
165. Privman N. (Editor): Finite-size scaling and numerical simulation // World scientific, 1990.

166. Фишер М. Теория сингулярностей в критической точке // Устойчивость и фазовые переходы // Пер. с англ. С.П. Малышенко, Е.Г. Скороцкой. – М.: Мир, 1973. – С. 373.
167. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Рамазанов М.К. Критические свойства трехмерной фрустрированной модели Изинга на кубической решетке // ФТТ. – 2005. - Т. 47, №6. – С.1125-1129.
168. Муртазаев А.К. Моделирование малых магнитных частиц  $V_2O_3$ . // Математическое моделирование. – 1992. – Т. 4, № 9. – С. 114-120.
169. Муртазаев А.К., Фаворский И. А. Моделирование малых магнитных частиц  $Cr_2O_3$  и  $Fe_2O_3$  // ФНТ. – 1993. - Т. 19, № 2. - С. 160-164.
170. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей // ЖЭТФ – 2001. – Т. 120, № 6. – С. 1535-1543.
171. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A., Khizriev K.Sh. Critical properties of model of a real magnetic Gd // Physics of Metals and Metallography. – 2001. – Vol. 92. – P. 110 – S114
172. Murtazaev A.K., Magomedov M.A. J. Mag. Mag. Mater. 300 – 2006. – P.570.
173. A large list of works in the Histogram Method that predate the papers of Ferrenberg and Swendsen is given in Ref. [18] of Lee J. and Kosterlitz J. M. Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions // Physical Review B. – 1991. – Vol. 43. – P. 3265-3277.
174. Barber M.N. Non-universality in the Ising model with nearest and next-nearest neighbor interactions // Journal of Physics A. – 1979. –Vol. 12, no. 5. – P. 679–688.
175. Landau D.P., Binder K. Phase diagrams and critical behavior of Ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings // Physical Review B. – 1985. –Vol. 31, no. 9. – P. 5946-5953.
176. Plascak J.A. Renormalization group study of the two-dimensional Ising model with crossing bonds // Physica A. – 1992. – Vol. 183. – P. 563-573.

177. Nightingale M.P. Non-universality for Ising-like spin systems // *Physics Letters*. - 1977. - Vol. 59A, no. 6. – P. 486-488.
178. Swedensen R.H., Krinsky S. Monte Carlo Renormalization Group and Ising Models with  $n \geq 2$  // *Physical Review Letters*. – 1979. – Vol. 43, no. 3. – P.177-180.
179. Minami K., Suzuki M. Non-universal critical behaviour of two-dimensional Ising systems // *Journal of Physics A*. – 1994. – Vol. 27. – P. 7301-7311.
180. Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло // *УФН*. – 2006. – Vol. 176. – P. 1119.
181. Binder K., Wang J.Sh. Finite-size effects at critical points with anisotropic correlations: phenomenological scaling theory and Monte Carlo simulations // *Journal of Statistical Physics*. – 1989. – Vol. 55. – P. 87-127.
182. Binder K., Heermann D. W. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. - Springer\_Verlag, 1988; - М.: Nauka, 1995.
183. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Фазовые переходы и критические свойства фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями следующих за ближайшими соседями // *ЖЭТФ*. – 2012. – Т. 142, вып. 2. - С. 338-344.
184. Kassan-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., Proshkin A.I. Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2015. – Vol. 384. – P. 247-254.
185. Butera P., Comi M. Critical universality and hyperscaling revisited for Ising models of general spin using extended high-temperature series // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65. – P. 144431.
186. Butera P., Comi M.  $\Phi_3^4$  lattice field theory viewed from the high-temperature side // *Physical Review B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 014442.
187. Plischke M., Oitmaa J. Ising models with  $n > 1$ : A series-expansion approach // *Physical Review B*. – 1979. – Vol. 19, no. 1. – P. 487-493.

188. Velgakis M.J., Ferer M. Fluctuation-induced, first-order transition in a bcc Ising model with competing interactions // *Physical Review B*. – 1983. – Vol. 27, no. 1. – P.401-412.
189. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А., Курбанова Д.Р. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // *ЖЭТФ*. – 2015. – Т. 147, вып. 1. – С. 127.
190. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Абуев Я.К., Бадиев М.К., Курбанова Д.Р. Исследование критических свойств модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих за ближайшими соседями // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, вып. 6. – С. 1082-1088.
191. Musial G., Rogiers J. On the possibility of nonuniversal behavior in the 3D Ashkin-Teller model // *Physica status solidi (b)*. – 2006. – Vol. 243, no. 1. – P. 335-338.
192. Le Guillou J.C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // *Physical Review B*. – 1980. – Vol. 21. – P. 3976 -3998.
193. George M.J., Rehr J.J. Two-series approach to partial differential approximants: three-dimensional Ising models // *Physical Review Letters*. – 1984. – Vol. 53, no. 22. – P. 2063-2066.
194. Guida R., Zinn-Justin J. 3D Ising model: the scaling equation of state // *Nuclear Physics B*. – 1997 – Vol. 489. – P. 626-652.
195. Campostrini M., Pelissetto A., Rossi P., Vicari E. Improved high-temperature expansion and critical equation of state of three-dimensional Ising-like systems // *Physical Review E*. – 1999. –Vol. 60, no. 4. – P. 3526-3562.
196. Hasenbusch M., Pinn K., Vinti S. Critical exponents of the three-dimensional Ising universality class from finite-size scaling with standard and improved actions // *Physical Review B*. – 1999. –Vol. 59, no. 17. – P. 11471.
197. Blote H. W.J., Luijten E., Heringa J.R. Ising universality in three dimensions: a Monte Carlo study // *Journal of Physics A*. – 1995. –Vol. 28. – P. 6289-6313.

198. Blote H.W.J., Shchur L.N., Talapov A.L. The cluster processor: new results // *Int. Journal of Modern Physics*. – 1999. – Vol. 10, no. 6. – P. 1137-1148.
199. Campostrini M., Hasenbusch M., Pelissetto A., Rossi P., Vicari E. Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65. – P. 144520.
200. Sushkov O.P., Oitmaa J., Weihong Z. Quantum phase transitions in the two-dimensional J1-J2 model // *Physical Review B*. - 2001. – Vol. 63. – P. 104420.
201. Diep H.T. Low-temperature properties of quantum Heisenberg helimagnets // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 40, no. 1. – P. 741-744.