

## О Т З Ы В

официального оппонента на диссертационную работу Курбановой Джумы Рамазановны «Фазовые переходы и критические свойства спиновых решеточных моделей с конкурирующими взаимодействиями», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Исследование фазовых переходов и критических явлений – одна из самых сложных и интересных задач статистической физики. Центр тяжести современных теоретических исследований в области физики фазовых переходов переместился от простых идеализированных моделей в сторону изучения более сложных и реалистичных систем. К такого рода системам в первую очередь относятся сложные системы, содержащие разного рода неоднородности (примеси, дефекты и др.), нелинейные структурные особенности (вихри, скирмионы и др. топологические структуры), фрустрации, конкурирующие взаимодействия и другие факторы.

В последнее время особое внимание уделяется системам с фрустрациями, поскольку они зачастую проявляют поведение, существенно отличное от соответствующих нефрустрированных систем. Наличие конкурирующих взаимодействий в таких системах приводит к образованию новых классов универсальности критического поведения, к изменению рода фазового перехода, к смещению границ устойчивости той или иной фазы, а зачастую и к формированию совершенно новых фаз и состояний. Очевидно, что исследование закономерностей влияния на фазовые переходы и критические явления фрустрированных спиновых состояний является актуальной задачей современной физики конденсированных сред как с теоретической, так и с прикладной точки зрения.

Вместе с тем применение хорошо разработанных методов флуктуационной теории фазовых переходов, например, метода ренормализационной группы, в случае достаточно сильной фрустрации оказывается невозможным, поэтому на сегодняшний день, видимо, наиболее эффективным подходом к исследованию такого рода систем является компьютерное моделирование, в первую очередь, различные варианты метода Монте-Карло, в сочетании с теорией конечно-размерного скейлинга. Методы компьютерного моделирования обладают рядом ценных преимуществ, связанных не только с их строгой математической обоснованностью и возможностью контроля погрешности в рамках самих методов, но и с тем, что данные численного эксперимента можно сопровождать полной картиной происходящих процессов и большим объемом детальной сопутствующей информации.

Настоящая диссертация посвящена исследованию методами вычислительной физики (различными алгоритмами метода Монте-Карло) критического поведения конкретных спиновых решеточных моделей с

конкурирующими взаимодействиями. Данные методы позволяют изучить максимально приближенные к реальности модели сложных физических систем, исследование которых другими методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых проблем. Все это показывает актуальность использования методов вычислительной физики для изучения критических явлений.

Исследование критического поведения моделей спиновых систем с фрустрациями и вычисление их критических параметров дает существенную информацию об особенностях этих систем и может позволить однозначно ответить на вопрос о существовании новых классов универсальности критического поведения.

Целью диссертационной работы является исследование фазовых переходов и статических критических свойств фрустрированных моделей Изинга и Гейзенберга с конкурирующими взаимодействиями на различных типах решеток на основе современных алгоритмов метода Монте-Карло. Для исследования данных систем автор использовал высокоэффективный репличный обменный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло.

В процессе выполнения работы, автором решались следующие основные задачи:

1. исследование фазовых переходов и статических критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей с целью определения влияния величины взаимодействия вторых ближайших соседей на характер критического поведения таких систем;
2. изучение фазовых переходов, статических критических свойств и особенностей влияния конкурирующих обменных взаимодействий на поведение трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей;
3. исследование фазовых переходов трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Определение влияния величины взаимодействия вторых ближайших соседей на класс универсальности критического поведения;

Диссертационная работа Д.Р. Курбановой изложена на 149 страницах и состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы из 201 наименований, содержит 76 рисунков и 5 таблиц.

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, обозначена цель работы, приводятся основные научные положения, выносимые на защиту, дается краткая аннотация по главам.

Отметим наиболее важные результаты, полученные в каждой главе.

**Первая глава** посвящена описанию классического метода Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю. На примере модели Изинга рассмотрен классический алгоритм метода Монте-Карло, основанный на перевороте одного спина (алгоритм Метрополиса). Показано, что в критической

области в фрустрированных системах данный алгоритм сталкивается с проблемой так называемого «критического замедления». Далее приводится подробное описание более эффективных и современных алгоритмов: репличный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Данные алгоритмы, в отличие от алгоритма Метрополиса, позволяют преодолеть проблему многочисленных долин локальных минимумов энергии, возникающую при исследовании фрустрированных спиновых систем. Здесь также представлено описание решеточных моделей, наиболее часто используемых при исследованиях кооперативных явлений.

**Вторая глава** диссертации носит обзорный характер теоретических и экспериментальных исследований, а также включает в себя изложение результатов численных исследований статических критических свойств фрустрированной модели Изинга на квадратной решетке с конкурирующими взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей.

Обсуждается природа спиновых стекол и фрустрированных спиновых систем, дан механизм возникновения фрустрации на примере треугольной решетки. Подробно изложены основные положения теории конечно-размерного скейлинга. Приводится описание гистограммного метода Монте-Карло, который позволяет хорошо тестировать тип фазового перехода в системе.

Также на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло автором проведено исследование двухмерной фрустрированной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины параметра фрустрации  $k$ , характеризующего отношение взаимодействий вторых и первых ближайших соседей. Обнаружены границы смены рода фазовых переходов. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитан полный набор основных статических критических индексов. Показано, что значения индексов для разных  $k$  в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.4$  практически не зависят от  $k$  и в этом интервале сохраняется класс универсальности критического поведения. Однако, при дальнейшем увеличении значения  $k$  ( $0.7 \leq k \leq 1.0$ ), наблюдается резкое изменение значений всех индексов. В данном интервале наблюдается неуниверсальное критическое поведение системы. В интервале значений  $0.5 < k < 0.67$  в системе реализуется фазовый переход первого рода. Автором установлено, что точка  $k=0.5$  является точкой частично фрустрированного состояния.

**Третья глава** посвящена исследованию фазовых переходов и статических критических свойств трехмерных антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей на объемно-центрированной кубической решетке.

Приводятся результаты исследования антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Результаты данной работы показывают, что в интервалах  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдаются фазовые переходы второго рода.

Автор впервые на диаграмме обнаружил область ( $2/3 < k \leq 0.75$ ), где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Обнаружено, что при  $k=2/3$  в системе реализуется фазовый переход второго рода и конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению полностью фрустрированного состояния.

Кроме того, впервые получены все возможные магнитные структуры основного состояния, соответствующие различным областям фазовой диаграммы. Вычислен полный набор основных статических магнитных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , параметра порядка  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индексы Фишера  $\eta$ . Проведено сопоставление полученных данных с данными других авторов. Показано, что трехмерная антиферромагнитная модель Изинга с взаимодействием вторых ближайших соседей в интервале  $0.0 \leq k \leq 0.6$  не меняет характер своего критического поведения и относится к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная модель Изинга на кубической решетке. В интервале  $0.8 \leq k \leq 1.0$  изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к смене класса универсальности критического поведения.

В этой же главе представлены результаты исследования термодинамических и критических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Фазовая диаграмма, полученная для этой модели, качественно совпадает с диаграммой  $3d$  модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. 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 фазовый переход второго рода.

Кроме того, исследование критических свойств этой модели с вычислением ее критических параметров представляет особый интерес, так как в литературе практически нет работ такого характера. На основе теории конечно-размерного скейлинга автором рассчитаны все основные магнитные критические индексы. Полученные значения критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , параметра порядка  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$ , радиуса корреляции  $\nu$  и индексы Фишера  $\eta$  свидетельствуют о том, что класс универсальности для этой модели не меняется в интервале значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  и относится к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная модель Гейзенберга на кубической решетке.

**В заключении** кратко сформулированы основные результаты, и представлены обобщающие выводы.

Наиболее существенными из этих результатов, на наш взгляд, являются:

1. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей для двухмерной модели Изинга на квадратной решетке. Установлено, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является фазовым переходом первого рода. Обнаружена точка частичной фрустрации ( $k=0.5$ ). Показано,

что класс универсальности критического поведения для модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых не меняется в пределах изменения значения соотношения обменного взаимодействия  $0.0 \leq k < 0.5$ , а в интервале  $0.7 \leq k \leq 1.0$  наблюдается неуниверсальное критическое поведение;

2. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей для трехмерной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке. Показано, что для всех значений  $k$  в интервалах  $0.0 \leq k \leq 2/3$  и  $0.75 < k \leq 1.0$  наблюдается фазовый переход 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 фазовый переход второго рода. Впервые получены все возможные магнитные структуры основного состояния для различных соотношений обменных взаимодействий  $k$ . Установлено, что в системе возможно всего 6 различных упорядочений в основном состоянии;
3. Проведен расчет основных эффективных магнитных критических индексов  $3d$  антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Установлено, что класс универсальности критического поведения не меняется в пределах значения  $0.0 \leq k \leq 0.6$ . При дальнейшем увеличении  $k$  в интервале  $0.8 < k \leq 1.0$  происходит резкое изменение всех значений критических индексов, система проявляет неуниверсальное критическое поведение;
4. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей для антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей. Впервые на диаграмме обнаружена область  $2/3 < k \leq 0.75$ , где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Установлено, что при значении  $k=2/3$  наблюдается фазовый переход второго рода, и конкуренция обменного взаимодействия не приводит к возникновению полностью фрустрированного состояния. Показано, что класс универсальности критического поведения сохраняется вплоть до значения  $k=2/3$ ;
5. Разработан комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать особенности фазовых переходов и статические критические свойства спиновых моделей с фрустрациями. На конкретных примерах показана эффективность применения репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло для исследования фрустрированных спиновых систем.

Завершая обсуждение диссертации, следует отметить большой объем проделанной вычислительной работы и тщательность ее выполнения. Также заслуживает положительной оценки тот факт, что диссертация написана хорошим языком, результаты изложены в строгой логической последовательности, работа легко читается, в ней практически отсутствуют опечатки.

Вместе с тем при ознакомлении с диссертацией возникли некоторые вопросы, замечания и пожелания, на которые хотелось бы получить пояснения:

- 1. Полученные автором результаты, касающиеся смены характера критического поведения и фазовой диаграммы модели Изинга при изменении величины параметра фрустрации, очень интересны. Вместе с тем в диссертации не обсуждается природа суперантиферромагнитной фазы двумерной модели Изинга на квадратной решетке. В случае трехмерной ОЦК решетки аналогичная фаза обсуждается. В связи с этим хотелось бы также на качественном уровне понять характер фазового перехода в двумерной модели в предельном случае  $k$ , стремящегося к бесконечности.*
- 2. Хотелось бы более глубоко понять природу неуниверсального поведения системы при фазовом переходе второго рода (например, область  $0.8 < k \leq 1.0$  для трехмерной модели Изинга). Можно ли сказать, каков характер разложения Ландау в этом случае?*
- 3. Было бы желательно выполнить расчет критических индексов для модели Гейзенберга в области значений  $0.75 < k \leq 1.0$ . Почему-то автором это не сделано.*
- 4. Большой интерес представляет более точное определение значения параметра  $k$ , при котором происходит смена фазового перехода 1-го рода на фазовый переход 2-го рода.*
- 5. В автореферате приведен Рис. 2.5 из диссертации (Рис. 2 в автореферате), соответствующий большим значениям параметра  $k$ . Однако без Рисунка 2.3 это приводит к некорректному пониманию полной физической картины поведения системы, что усугубляется утверждением из автореферата «...увеличение значения  $k$  ведет к росту температуры ФП...»).*

В целом диссертация Д.Р. Курбановой является законченным, оригинальным исследованием, выполненным на высоком современном научном уровне. Полученные результаты обладают научной новизной и стимулируют дальнейшее развитие исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической теории конденсированного состояния. Достоверность результатов основана на фундаментальном характере использованных при расчетах методов, надежность которых не вызывает сомнения. Выводы и заключения автора полностью обоснованы.

Основные результаты диссертации опубликованы в открытой печати и обсуждались на многочисленных всероссийских и международных научных конференциях. Автореферат и публикации соответствуют содержанию диссертации. Сделанные замечания и имеющиеся технические неточности в оформлении не снижают общего хорошего впечатления о диссертации и не влияют на общую оценку диссертации как вполне законченной и актуальной.

Диссертационная работа Д.Р. Курбановой удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор несомненно заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Заместитель директора Института  
физики им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
доктор физико-математических наук

В.Н. Рыжов

ФГБУН Институт физики им. Л.Ф. Верещагина РАН  
108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр.14  
телефон: (495) 851-00-13  
e\_mail: [ryzhov@hppi.troitsk.ru](mailto:ryzhov@hppi.troitsk.ru)

Подпись Рыжова В.Н.

заверяю:

Ученый секретарь ИФВД РАН

к.ф.-м.н

03.09.2018



Т.В. Валянская