

## УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной деятельности  
Федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего  
образования «Казанский (Приволжский)  
федеральный университет», д.г.-м.н.,

профессор Нургалиев Данис Карлович



09 2018г.

## ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

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

### **Актуальность темы исследования**

Работа направлена на решение фундаментальной проблемы по разработке теории фазовых переходов и критических явлений в магнитных материалах с фрустрациями, обусловленных конкуренцией обменных взаимодействий. Фрустрированные спиновые системы обладают необычными магнитными свойствами, отличными от соответствующих нефрустрированных магнитных материалов. Например, они могут характеризоваться отсутствием магнитного порядка, что связано с зависимостью таких систем от различного рода возмущающих факторов, таких как анизотропия, величина и тип обменного взаимодействия, зависимость от внешнего магнитного поля, примесей, учета взаимодействий вторых ближайших соседей и др.

Исследование фрустрированных спиновых систем традиционными методами сталкивается со значительными трудностями при попытке определить тип фазового перехода, вычислить критические параметры и определить особенности критического поведения. Это приводит к тому, что фазовые переходы и критические явления в таких системах интенсивно исследуются методами вычислительной физики, в частности методами Монте-Карло.



В диссертационной работе Д.Р. Курбановой методами Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга со взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей, а также с вычислением полного набора статических критических параметров. Диссертантом исследованы следующие модели:

1. Двумерная фрустрированная модель Изинга на квадратной решетке;
2. Трехмерная антиферромагнитная модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке;
3. Трехмерная антиферромагнитная модель Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке.

Изучение фазовых переходов и критических явлений в этих моделях, определение классов универсальности и особенностей их формирования является **важной и актуальной задачей** современной физики конденсированных сред.

В своем исследовании автор применяет высокоэффективный репличный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Для расчета статических критических индексов используется теория конечно-размерного скейлинга. Такой подход позволяет проводить исследования критического поведения фрустрированных спиновых систем и определить критические параметры с хорошей степенью точности.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитированной литературы. Работа изложена на 149 страницах, включает в себя 76 рисунков, 5 таблиц и список литературы из 201 наименований.

Во **введении** диссертации обосновывается актуальность темы, формулируются цели и задачи работы. Приводятся основные положения, выносимые на защиту. Здесь же оговаривается научная и практическая значимость работы, дается краткая аннотация содержания глав.

В **первой главе** приводится описание применяемых в исследовании методов, алгоритмов, классических спиновых решеточных моделей и их особенностей. Рассмотрен классический метод Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю. На примере модели Изинга рассмотрен классический алгоритм метода Монте-Карло, основанный на перевороте одного спина (алгоритм Метрополиса). Приводится подробное описание более эффективных и современных методов Монте-Карло: репличный алгоритм и алгоритм Ванга-Ландау. Данные алгоритмы специально разработаны для исследования спиновых систем с фрустрациями. Также дается описание моделей, наиболее часто используемых при



исследовании фазовых переходов и критических явлений с дискретным (модель Изинга) и непрерывным (модель Гейзенберга) распределением спиновых состояний.

**Вторая глава** диссертации включает в себя обзор современного состояния теоретических и экспериментальных исследований статических критических свойств фрустрированных спиновых систем и результаты исследований, полученные автором при исследовании двухмерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Рассматривается механизм возникновения фрустраций в системе на примере треугольной решетки. Приведены основные положения теории конечно-размерного скейлинга и особенности определения критической температуры и критических индексов. Здесь же, приводятся результаты собственных исследований критического поведения фрустрированной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $k$  ( $k=J_2/J_1$  – параметр, характеризующий величину взаимодействия вторых ближайших соседей). Установлено, что точка  $k=0.5$  является точкой с достаточно сильно фрустрированным состоянием. Получен полный набор основных магнитных критических индексов этой модели для различных значений отношения параметра обменного взаимодействия  $k$ . Показано, что класс универсальности критического поведения этой модели сохраняется в пределах значения  $0.0 \leq k \leq 0.4$ . Изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к неуниверсальному критическому поведению в интервале  $0.7 \leq k \leq 1.0$ .

В **третьей главе** на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло исследуются фазовые переходы и статические критические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Изинга и Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых  $J_1$  и вторых  $J_2$  ближайших соседей. 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. Автором обнаружена область фазовой диаграммы ( $2/3 < k \leq 0.75$ ), где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Получены 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. Обнаружено, что в точке  $k=2/3$ , где ожидалось появление фрустрации, наблюдается фазовый переход второго рода. Вычислен полный набор основных статических магнитных критических индексов. Анализ данных проводился на основе теории конечно-размерного скейлинга. 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  $0.8 \leq k \leq 1.0$  наблюдается довольно резкое изменение значений критических индексов. Изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей в этом интервале приводит к смене класса универсальности критического поведения.

В этой же главе представлены результаты исследования трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Следует отметить, что исследование классической системы Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей методом Монте-Карло до сих пор не проводилось. Автором впервые вычислен весь набор основных магнитных критических индексов этой модели при разных значениях величины  $k$ . Показано, что трехмерная антиферромагнитная модель Гейзенберга с взаимодействием первых и вторых ближайших соседей в интервале значений  $0.0 \leq k \leq 0.6$  не меняет характер своего критического поведения и относится к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная модель Гейзенберга на кубической решетке. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $k$ . На фазовой диаграмме, как и для модели Изинга на аналогичной решетке, 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.

**В заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

**Научную новизну** диссертационной работы определяют следующие результаты исследования, полученные лично соискателем.



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 второго рода за исключением области ( $0.5 < k < 0.67$ ). Обнаружена точка фрустрации ( $k=0.5$ ). Установлено, что класс универсальности критического поведения этой модели 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  $k$ . Показано, что в системе возможно всего 6 различных упорядочений в основном состоянии.
3. Установлено, что класс универсальности критического поведения модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями не меняется в пределах значения  $0.0 \leq k \leq 0.6$ . При изменении значения в интервале  $0.75 < k \leq 1.0$  происходит резкое изменение всех значений критических индексов, система проявляет неуниверсальное критическое поведение.
4. Показано, что класс универсальности критического поведения для антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей сохраняется вплоть до значения  $k=2/3$ . Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия 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.



### **Обоснованность и достоверность научных положений и полученных результатов**

Достоверность полученных в диссертации результатов основана на фундаментальном характере методов, использованных при расчетах, надежность которых не вызывает сомнения. Полученные результаты согласуются с немногочисленными имеющимися в литературе данными лабораторных экспериментов и с машинными расчетами других авторов, а их интерпретация проводится с привлечением современных теоретических представлений. Результаты, приведенные в диссертации, проверены с помощью независимых методов: репличным обменным алгоритмом и алгоритмом Ванга-Ландау метода МК. Полученные данные хорошо согласуются между собой. Основные результаты работы опубликованы в реферируемых и высокорейтинговых научных изданиях и обсуждались на многочисленных Всероссийских и Международных научных конференциях.

### **Теоретическая и практическая ценность работы**

Полученные в диссертации результаты по исследованию статических критических свойств фрустрированных спиновых моделей представляют интерес для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической физики конденсированного состояния. Разработанный комплекс программ для ЭВМ формирует базу, на основе которой возможны исследования статических критических явлений в фрустрированных спиновых системах. Использование репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода МК для исследования моделей фрустрированных спиновых систем позволяет определять с высокой степенью надежности критические параметры системы и являются значительно более эффективными по сравнению с классическим алгоритмом (алгоритм Метрополиса). Данные алгоритмы успешно справляются с проблемой локальных энергетических минимумов, для решения которой другие алгоритмы метода МК оказались малоэффективными. 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.

**Замечания по диссертационной работе.** По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. На странице 8 идет перечисление: *«Увеличению точности методов ВФ способствуют [48-54]:*

*1. рост вычислительных мощностей современных ЭВМ;*

*2. разработка мощных высокоэффективных алгоритмов;*

*3. .... ».* Указанные пункты не совсем корректны, так как увеличение мощности ЭВМ и разработка мощных алгоритмов позволяют ускорить расчеты, но не имеют непосредственного влияния на точность методов. Не понятно, что подразумевает автор под терминами «суперструктуры» и «экзотические особенности упорядочения» (стр.9)? На странице 11 (первый абзац) приводится следующее предложение: *«... 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]».* Предложение не совсем корректное, так как в основе работы ЭВМ и процессоров (микропроцессоров) лежат полупроводниковые приборы – транзисторы, направленные на выполнение любых арифметических и логических операций.

2. В выражении (2.1) величины  $S_i$  и  $S_j$  – являются спинами, а не магнитными моментами как указывается в тексте диссертации на стр. 42. На стр. 70 утверждение «Как очевидно, увеличение линейных размеров решетки вызывает расщепление теплоемкости» является некорректным и нефизичным.

3. В работе отсутствует сравнение полученных результатов моделирования с экспериментальными данными для конкретных (не модельных) систем.

Отмеченные замечания более связаны с грамматикой и не снижают общей положительной оценки диссертационной работы.

### **Заключение**

Диссертационная работа Курбановой Джумы Рамазановны на тему: «Фазовые переходы и критические свойства спиновых решеточных моделей с конкурирующими взаимодействиями» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу. Исследования проведены на достаточно высоком научном уровне. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.



Учитывая актуальность проведенных научных исследований, строгую обоснованность результатов диссертации и их научную значимость, можно заключить, что диссертационная работа Курбановой Джумы Рамазановны удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а сам диссертант заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Отзыв рассмотрен на заседании кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов Института физики Казанского (Приволжского) федерального университета (протокол №5 от 04.09.2018г.)

Заведующий кафедрой вычислительной физики  
и моделирования физических процессов  
Института физики ФГАОУ ВО «Казанский  
(Приволжский) федеральный университет»,  
доктор физико-математических наук

Мокшин А.В.

Институт физики  
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»  
420008, Россия, РТ, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 16а  
тел.: (843) 233-77-37  
e\_mail: [anatolii.mokshin@mail.ru](mailto:anatolii.mokshin@mail.ru)

Подпись Мокшина А.В. заверяю:  
Ученый секретарь Ученого совета Института  
физики ФГАОУ ВО «Казанский  
(Приволжский) федеральный университет»,  
профессор, доктор физико-математических  
наук

Прошин Ю.Н.

*Ладина Ирина Юрьевна*  
*Ирина Юрьевна Ладина*