

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА-ОБОСОБЛЕННОЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ДАГЕСТАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

МУРТАЗАЕВ КУРБАН ШАМИЛЬЕВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МОДЕЛЕЙ ИЗИНГА И
ГЕЙЗЕНБЕРГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ В
МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

1.3.8. 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**

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
ГЛАВА 1. СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ОБМЕННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ	17
1.1 Фрустрированные спиновые системы.....	17
1.2 Модель Изинга.....	23
1.3 Модель Гейзенберга.....	25
1.4 Гистограммный метод анализа Монте-Карло данных.....	28
ГЛАВА 2. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО	32
2.1 Классический метод Монте-Карло.....	32
2.2 Алгоритм Метрополиса.....	39
2.3 Репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло.....	41
ГЛАВА 3. АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА ОБЪЕМНО- ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ	47
3.1 Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в антиферромагнитной фазе 2-го типа.....	47
3.2 Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в вырожденном состоянии.....	62
3.3 Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в антиферромагнитной фазе 1-го типа.....	73
ГЛАВА 4. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ	87
4.1. Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга в антиферромагнитном состоянии 2-го типа.....	87
4.2. Влияние магнитного поля на фазовые переходы и магнитные свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга в антиферромагнитном состоянии 1-го типа.....	98
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	106
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ И РАБОТ АВТОРА	109
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	115
СПИСОК СОКРАЩЕННЫХ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	137

ВВЕДЕНИЕ

Изучение фазовых переходов (ФП), магнитных и термодинамических свойств спиновых систем с обменными взаимодействиями в настоящее время представляет большой интерес для физики конденсированного состояния. Конкуренция обменных взаимодействий спинов в магнитных системах приводит к фрустрированному состоянию [1, 2]. Магнитные системы, в которых присутствуют эффекты фрустрации имеют множество разнообразных фаз. Фрустрации могут менять тип фазового перехода в системе [3, 4].

Данная диссертационная работа посвящена исследованию ФП, термодинамических и магнитных свойств антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля (МП).

Последние 30-40 лет с большим интересом проводятся исследования спиновых систем с фрустрациями, применяя самые разные методы: теоретические, экспериментальные или численные. Несмотря на интенсивность исследований, полученные результаты в этой области не позволяют в полной мере получить целостную картину свойств и процессов, протекающих в подобных системах. Другим важным аспектом является изучение вопросов, связанных с ФП и термодинамическими свойствами спиновых систем с фрустрациями на различных типах кристаллической решетки. Анализ литературных данных показывает, что в зависимости от типа кристаллической решетки может меняться род ФП. В ряде исследований обнаружено наличие фазовых переходов второго рода при заданных значениях числа компонентов параметра порядка, а часть работ указывает на ФП 1-го рода [5-8].

Обычно в фрустрированных системах наблюдается ФП 2-го рода. Критические параметры спиновых систем имеют существенные различия

между разными авторами. Также критические свойства системы сильно зависят от используемого экспериментального метода и способов расчета. Если провести анализ имеющихся литературных данных, то можно выделить работы, где в системах с конкурирующими спиновыми взаимодействиями наблюдаются явные признаки ФП 1-го рода, либо слабо выраженные ФП 1-го рода, или ФП 2-го рода [9-15]. Другой важный аспект, связанный с особенностями рассматриваемых спиновых систем, заключается в том, что учет обменного взаимодействия вторых и более соседей может привести к изменению рода ФП. Сильное влияние на характер ФП может оказывать сама величина взаимодействия вторых и последующих соседей. Особенности ФП при различных вариациях соотношений обменных спиновых взаимодействий между первыми соседями J_1 и вторыми ближайшими соседями J_2 известны только в общих чертах. На сегодняшний день в физике ФП остаются дискуссионными вопросы о зависимости критических свойств и ФП от значения обменного интеграла J_2 [16-19]. Для получения ответов на ряд существующих вопросов, судя по всему, необходимо провести полноценный комплекс исследований, магнитных спиновых систем на основе микроскопических Гамильтонианов [20].

Особый интерес представляют исследования влияния на физические свойства подобных систем различных внешних и внутренних факторов: внешнее МП, взаимодействие ближайших спинов, немагнитные спины, тепловые флуктуации. Учет возмущающих взаимодействий приводит фрустрированные спиновые системы к абсолютно другому поведению [21]. Например, ферриты с фрустрированной магнитной структурой обладают новыми магнитными свойствами. Фрустрированная магнитная структура в ферритах может быть получена за счет конкуренции обменных взаимодействий, а также за счет немагнитного разбавления. Для создания новых магнитных материалов важное значение имеет изучение влияния внешнего МП на свойства ферритов с конкурирующими обменными взаимодействиями [22-26]. Внешнее МП в системах с конкурирующими

спиновыми взаимодействиями может сыграть решающую роль на фундаментальных свойствах системы [27, 28].

Теория ФП и критических явлений претерпела значительное развитие в течение последних 40 лет, начиная с работ Ландау и его коллег в 1930-х годах, созданная на феноменологической теории. Самыми эффективными стали такие методы как, ренормализационная группа, эpsilon-разложение и применение гипотезы скейлинга. Эти методы были развиты во второй половине 20-го века [1, 2, 29-34]. Благодаря этим методам современная теория ФП и критических явлений получила множество важных результатов. Используя теорию ренормализационной группы, эpsilon-разложение и гипотезу скейлинга были установлены важные закономерности вблизи критических температур, что является большим достижением в физике ФП и критических явлений. Также благодаря этим методам удалось вывести соотношения между разными критическими индексами, критическими амплитудами, удалось рассчитать значения самих критических индексов, амплитуд и уравнения состояний. Пользу этих методов для физики конденсированного состояния трудно переоценить.

В теории ФП можно выявить четкую взаимосвязь характеристик ФП с микроскопическими обменными взаимодействиями в системе. Это позволяет более-менее анализировать механизмы переходов и основных параметров системы, определяющих критическое поведение. Тем не менее, остаются нерешенными многие вопросы, связанные с построением точной микроскопической теорией ФП второго рода и критических явлений [35].

Метод, основанный на высокотемпературном и низкотемпературном разложении, также внес огромный вклад в количественную оценку теории критических явлений в спиновых системах [31, 36]. Несмотря на наличие всех вышеперечисленных методов и приемов, строгой и последовательной микроскопической теории ФП на момент написания данной диссертации не существует.

Наличие точных аналитических решений спиновых систем играют колоссальную роль в создании микроскопической теории фазовых переходов. Но точное решение на сегодня имеют очень малое количество решеточных спиновых моделей. Эрнст Изинг получил аналитическое решение для одномерной модели в 1925 году и в ней не обнаружился ФП. Ларс Онзагер же аналитически решил двумерную квадратную решетку без внешнего МП, и обнаружил ФП 2-го рода. Не смотря на полученные аналитические решения одномерной и двумерной модели Изинга создание последовательной и строгой теории фазовых переходов 2-го рода остается актуальным на сегодня [35, 37]. Исследователи в области теоретической физики стараются описывать модели, где учтены свойства реальных кристаллов. К многочисленным свойствам реальных кристаллов можно отнести: анизотропию, не магнитные примеси в системе, величина магнитных спинов, диполь-дипольные взаимодействия, взаимодействия вторых и последующих соседей, температурные колебания кристаллической решетки, влияние внешнего МП, наличие фрустраций и т.д. [38-42]. В рамках классических моделей первого приближения таких моделей как: Изинга, X-Y модель, Гейзенберга такого рода многочисленные факторы остаются не учтенными.

Сравнительно недавно обнаруженные магнитные скирмионы как оказалось тоже являются следствием конкурирующих взаимодействий. Скирмион — это топологический объект в магнитных материалах, который имеет необычную магнитную структуру с хиральной симметрией как вихрь. Такого рода вихри образуются если в системе есть конкурирующее обменное взаимодействие Дзялошинского-Мории [43, 44]. Изучение скирмионов также вызывает интерес из-за их потенциального применения в технологиях при создании магнитной памяти. К преимуществам скирмионной памяти относится низкое энергопотребление, быстрая запись и чтение данных, высокая плотность хранения и устойчивость к дефектам. Скирмионы могут быть более устойчивы к внешним воздействиям и дефектам, чем другие магнитные структуры [45-52]. На конструирование магнитной памяти в

последние годы уделяется большое внимание. Проводятся множество численных расчетов и теоретических исследований. Магнитная память, где в роли ячеек памяти выступают скирмионы продемонстрировали преимущество над памятью основанной на перемещении магнитных доменов в нанотрубках [45-52].

В последние годы появляются работы по обнаружению ФП и прогнозированию критической температуры спиновых систем, выполненные на основе нейронной сети. Преимущество нейронной сети заключается в том, что она позволяет получить результат, не решая сложные аналитические уравнения. Для нейронной сети достаточно иметь набор некоторых входных данных. Но нейронные сети имеют свои недостатки. Даже после получения достоверного результата, зависимость одних параметров от других или аналитические выражения, по которым получен результат остаются не доступны исследователю. Также стоит отметить, что при изучении спиновых систем нейронными сетями для обучения нейронной сети, требуется большое количество массивов данных полученных на основе Моте-Карло (МК) расчетов. Нейронная сеть, в качестве входных данных использует снимки изображений спиновых конфигураций, полученные алгоритмом Метрополиса метода МК для прогнозирования ФП [38-41]. Обучение нейронной сети в зависимости от спиновой системы и количество частиц в системе может отнимать много машинного времени.

При исследовании критических свойств, выявлении закономерностей критического поведения, определении типа ФП, вычислении критических индексов существующими на сегодняшний день методами теоретической или экспериментальной физики сталкиваются с серьезными проблемами. Исследование $3-d$ систем на основе микроскопических гамильтонианов методами современной физики основываясь только лишь на теорию— задача чрезвычайно сложная [37, 53].

Для исследования таких сложных спиновых систем как: системы с обменными интегралами первых и вторых ближайших соседей, системы с

вырожденным основным состоянием, фрустрированные спиновые системы эффективнее всего использовать методы вычислительной физики в том числе методы МК и различные алгоритмы метода МК. [54-58]. Численный эксперимент на сегодняшний день является полноценным инструментом для изучения сложных систем и это требует от исследователя наличие задела в области программирования. Тем не менее вычислительная физика сегодня развивается как никогда раньше [56]. Для выполнения численного расчета сложных моделей с учетом спиновых взаимодействий первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей, с учетом внешнего магнитного поля на разных кристаллических решетках наиболее эффективным оказался репличный обменный алгоритм метода МК [111]. Также одним из эффективных методов для проведения численного эксперимента сложных спиновых систем является алгоритм Ванга-Ландау [112, 117].

Анализ научной литературы показывает, что системы с конкуренцией спиновых обменных взаимодействий подвержены высокочувствительному отклику на такой внешний фактор как магнитное поля [59-78]. Также дискуссионным остается вопрос о влиянии МП на род ФП в спиновых системах.

В настоящей диссертационной работе на основе высокоэффективного репличного обменного алгоритма метода МК исследуются ФП термодинамические и магнитные свойств антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями в широком интервале температур и магнитных полей. Особенности влияния МП на ФП и термодинамические свойства в данных моделях почти не исследованы.

Таким образом, исследования систем с конкурирующими спиновыми взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля, с помощью методов МК представляют собой большой интерес в физике конденсированного состояния.

Целью диссертационной работы является исследование влияния магнитного поля на ФП, термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга с конкурирующими взаимодействиями методом МК.

Для выполнения цели диссертационной работы поставлены следующие научные задачи:

1. исследование термодинамических и магнитных свойств, а также особенностей влияния внешнего магнитного поля на фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей;
2. построение кривых температурных зависимостей теплоёмкости C , намагниченности M , энергии E для антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей в широком интервале значений магнитного поля;
3. построение фазовых диаграмм зависимостей критических температур от величины магнитного поля для антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке для разных величин взаимодействий первых и вторых ближайших соседей;
4. получение температурных зависимостей теплоёмкости C , восприимчивости χ , намагниченности M и минимальной энергии E_{min} для антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей;
5. построение фазовых диаграмм зависимостей критических температур от величины магнитного поля для антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке для разных величин взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Практическая ценность работы

Результаты исследований ФП и термодинамических и магнитных свойств антиферромагнитных спиновых систем при наличии внешнего магнитного поля имеют важную ценность для дальнейших исследований в разработке теории магнетизма и фазовых переходов. Исследования имеют практическую значимость потому, что такие возмущающие факторы как магнитное поле, взаимодействия вторых соседей и фрустрации могут оказывать большое влияние на характер фазовых переходов и термодинамических свойств магнитных систем. При исследовании образцов эти особенности должны быть учтены. Также разработанные модели для решения поставленных целей данной диссертации формируют базу программ с помощью, которых можно исследовать ФП, термодинамические и магнитные свойства сложных спиновых систем.

Результаты данной работы показали, что применение репличного обменного алгоритма метода МК позволяют с высокой эффективностью и точностью исследовать спиновые системы практически любой сложности по сравнению с классическими методами МК. Этот алгоритм успешно справляется с рядом проблем, где другие алгоритмы метода МК (алгоритм Метрополиса и другие) оказались малоэффективными или требуют много машинного времени.

Результаты компьютерного моделирования, полученные в ходе выполнения данной научно-квалификационной работы, используются для докладов и чтения таких курсов как: «Исследование фазовых переходов и критических свойств методами Монте-Карло», «Компьютерное моделирование в физике», «Методы численного эксперимента в физике». Также программы, разработанные в рамках данной диссертации, используются при выполнении практических работ студентами и аспирантами по указанным спецкурсам в Дагестанском государственном университете и институте физики ДФИЦ РАН.

Положения, выносимые на защиту:

1. Фазовые диаграммы зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля для модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей при наличии внешнего магнитного поля в случаях антиферромагнитного упорядочения 2-го типа ($k=J_2/J_1=1$), 1-го типа ($k=0.5$) и в вырожденном состоянии ($k=2/3$). Определение области магнитных полей, где с ростом температуры в системе реализуется два фазовых перехода.
2. Исследование особенностей влияния магнитного поля на фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке при соотношении обменных взаимодействий $k=1.0$, $k=2/3$ и $k=0.5$. Определение условий существования ФП 1-го рода и 2-го рода в зависимости от значений внешнего магнитного поля. Демонстрация существования частично разупорядоченных структур основного состояния.
3. Фазовые диаграммы антиферромагнитных моделей Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей при наличии внешнего магнитного поля в случае антиферромагнитного упорядочения 2-го типа ($k=1$) и 1-го типа ($k=0.5$). Доказательство существования только фазовых переходов 2-го рода во всем диапазоне значений магнитного поля. Демонстрация отсутствия влияния магнитного поля на род фазового перехода в данной модели.
4. Доказательство отсутствия полностью фрустрированного состояния в моделях Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей при наличии внешнего магнитного поля.

Научная новизна и значимость диссертационной работы

В физике конденсированного состояния до сих пор невыясненными остаются некоторые вопросы, связанные с влиянием магнитного поля на ФП, термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитных спиновых систем. В рамках данной работы был впервые проведен комплекс исследований антиферромагнитных моделей Изинга и Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом конкурирующих обменных взаимодействий при наличии внешнего магнитного поля. В результате определены некоторые закономерности влияния внешнего магнитного поля и величины взаимодействий вторых ближайших соседей на ФП, на структуры магнитного упорядочения, на фрустрации. Впервые построены фазовые диаграммы зависимости температуры ФП от величины МП как для антиферромагнитной модели Изинга, так и для антиферромагнитной модели Гейзенберга при разных соотношениях параметров обменных взаимодействий. Впервые для рассмотренных моделей Изинга и Гейзенберга определены магнитные структуры основного состояния, особенности ФП и диапазоны существования различных магнитных структур в зависимости от величины внешнего магнитного поля.

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. Полученные результаты хорошо согласуются между собой.

Апробация результатов работы

Основные результаты диссертационной работы были представлены на следующих конференциях и семинарах:

- Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (Махачкала 2019);

- XXI Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-21) (Екатеринбург 2021);
- XXIV международной конференции «Новое в Магнетизме и Магнитных Материалах» НМММ-2021 (Москва 2021);
- Международная конференция «Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах» (Махачкала 2021);
- Региональная научная сессия «Интеграция науки и образования» посвященная Дню Российской науки (Махачкала 2022);
- XIX Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Москва 2022);
- Научно-практическая онлайн-конференция «Междисциплинарные исследования науки, техники и образования (НТО-1)» приуроченной к 75-летию доктора физико-математических наук, профессора, академика РАН, Матиева Ахмета Хасановича (Грозный 2023);
- XX Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Москва 2023);
- Третья международная конференция ФКС-2023 «Физика Конденсированных Состояний», посвященная 60-летию ИФТТ РАН (Черноголовка 2023);
- Всероссийская научная школа для молодых исследователей, аспирантов и студентов старших курсов по проблемам исследований в сильных и сверхсильных магнитных полях (Технопарк Саров) 2023 и 2024 году;
- Международная конференция «Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах» (Махачкала 2023).
- Первая всероссийская школа-семинар по компьютерному моделированию «АтоМ» (Челябинск 2024 г.);
- Также многократно докладывались на лабораторных и институтских семинарах в ИФ ДФИЦ РАН;

Личный вклад автора

При выполнении данной научно-квалификационной работы научным руководителем были сформулированы основные цели и задачи исследования. Автором лично была проведена серия численных экспериментов и выполнены все расчеты на ЭВМ, обработаны и проанализированы все выходные данные. Разработка программ исследуемых моделей, на которые были получены соответствующие сертификаты о государственной регистрации программных продуктов в Роспатенте проводилось совместно с Магомедовым М.А. и Рамазановым М.К. Разработка модуля программы для визуализации магнитных структур основного состояния выполнена совместно с Магомедовым М.А. Подготовка публикаций и фазовых диаграмм выполнено совместно с Курбановой Д.Р. Обсуждение и обобщение результатов проводились совместно с научным руководителем и соавторами. Также автор лично представлял результаты исследований на научных конференциях, семинарах и сессиях.

Соответствие диссертации паспорту специальности

Содержание диссертации соответствует пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Публикации по теме диссертации. Результаты исследования опубликованы в 32 научных работах, из которых: 6 статей в журналах индексируемых в наукометрических базах Scopus и Web of Science [A1-A6], 2 – в журнале, входящей в РИНЦ [A7-A8]. Получены 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [A9-A11]. Список научных работ автора приведен в конце диссертации.

Объем работы

Данная диссертационная работа содержит введение, 4 главы, заключение, публикации автора и список цитируемой литературы. Полный объем диссертации составляет 137 страницы. Объем литературы составляет 219 наименования.

Содержание работы

Во введении приведена актуальность и освещение проблемы по исследуемой тематике диссертационной работы. Сформулированы основные цели и задачи исследования. Также сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава состоит из четырех параграфов. Приводится литературный обзор фрустрированных спиновых систем. Описаны классические модели Изинга и Гейзенберга. Рассматривается гистограммный метод анализа Монте-Карло данных.

Вторая глава состоит из трех параграфов. Описаны методы численного эксперимента. Подробно описан классический алгоритм метода Монте-Карло (алгоритм Метрополиса) и вариант репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло.

Третья глава состоит из трех параграфов. В этой главе приведены результаты исследований антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с конкурирующими взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля. В первом параграфе данной главы приведены результаты исследований Изинговской антиферромагнитной модели на ОЦК решетке с учетом обменных взаимодействий первых J_1 и вторых ближайших соседей J_2 при наличии внешнего магнитного поля для случая $k=J_2/J_1=1$. Также в этом параграфе приведен небольшой обзор антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с конкурирующими взаимодействиями без МП. Во втором параграфе данной главы приведены результаты исследований этой модели при

наличии внешнего МП для случая $k=2/3$, где наблюдается вырожденное состояние. Третий параграф главы посвящён результатам исследований антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий J_1 и J_2 при наличии внешнего магнитного поля для случая $k=0.5$.

Четвертая глава состоит из двух параграфов. Данная глава посвящена результатам исследования антиферромагнитной Гейзенберговской модели на ОЦК решетке с конкурирующими спиновыми взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля. Приведен краткий литературный обзор антиферромагнитных моделей Гейзенберга на разных решетках с учетом МП. В первом параграфе также приведены результаты исследований антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом спиновых взаимодействий J_1 и J_2 при наличии внешнего магнитного поля для случая $k=1.0$. Вторым параграфом этой главы посвящён результатам исследований антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с конкурирующими взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля для случая $k=0.5$.

В заключении приведены основные выводы диссертационной работы.

ГЛАВА 1. СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ОБМЕННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

1.1. Фрустрированные спиновые системы

В области магнетизма слово «фрустрация» впервые было введено в контексте спинового стекла для описания невозможности одновременного удовлетворения всех обменных процессов. Нас в первую очередь интересуют упорядоченные системы, которые можно описать периодическим гамильтонианом. В этом случае фрустрация более точно описывается как геометрическая фрустрация, концепция, которая получила следующее общее определение: о геометрической фрустрации говорят, когда локальные взаимодействия спинов не могут привести к минимизации энергии системы. Типичными примерами являются фрустрации с неопределенностью спина, где некоторые структуры, такие как двумерные треугольники, приводят к наличию регулярных узлов решетки с неопределенными спинами [79].

В диссертационной работе мы будем иметь дело в основном с двумя моделями: моделью Изинга:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad S_i S_j = \pm 1 \quad \text{или } \uparrow, \downarrow \quad (1.1)$$

и модель Гейзенберга:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.2)$$

где \vec{S}_i - единичные векторы, суммирование ведется по индексам i и j , i и j — номера взаимодействующих магнитных спинов, S_i , S_j — их магнитные моменты. В такой записи ферромагнитному взаимодействию атомов i и j соответствует $J_{ij} > 0$, антиферромагнитному — $J_{ij} < 0$.

Фрустрация может присутствовать только в том случае, если по крайней мере некоторые обменные взаимодействия являются антиферромагнитными, т.е. если некоторые из обменных интегралов J_{ij} отрицательны, поскольку, если все обменные взаимодействия ферромагнитны то конфигурация, где все спины

параллельны явно является основным состоянием. Однако, даже когда все связи являются антиферромагнитными, геометрическая фрустрация не обязательно реализуется. Действительно, для двухподрешеточной системы, такой как квадратная решетка, которая может быть разделена на две подрешетки таким образом, что каждый спин одной подрешетки связан только со спинами другой подрешетки, энергия модели Изинга или классической модели Гейзенберга просто минимизируется конфигурацией Нееля, в которой спины одной подрешетки параллельны друг другу и антипараллельны всем спинам другой подрешетки [80].

Необходимым условием для удовлетворения условия геометрической фрустрации только при антиферромагнитных обменных взаимодействиях является наличие системы с нечётной длиной. Однако этого недостаточно. Действительно, часто бывает возможно минимизировать энергию классической антиферромагнитной модели Гейзенберга с помощью простого спирального расположения спинов, если такое состояние является единственным основным состоянием, как в случае треугольной решетки с взаимодействиями ближайшего соседа, то система, строго говоря, не имеет геометрической фрустрации: геометрическая фрустрация возникает, когда нет единственного способа минимизировать энергию [81]. Для термодинамики не любой беспорядок является существенным.

В системах с Изинговскими спинами вырождение может привести к таким типам упорядочения при нулевой температуре как: дальнему порядку, алгебраическому порядку, дипольным корреляциям или полному беспорядку. Для модели Гейзенберга, флуктуации (тепловые или квантовые) играют важную роль. Они могут упорядочить систему, выбрав одно упорядоченное состояние из основного многообразия, но они также могут уничтожить любой вид магнитного дальнего порядка. Это открывает путь к новым типам основных состояний, таких как спиновая нематика (где параметром порядка является не локальный спин, а более сложный объект), кристаллы валентной связи (полностью немагнитные состояния с нарушенной трансляционной симметрией) или квантовые спиновые

жидкости, в которых сохраняется как симметрия поворота в спиновом пространстве, так и трансляционная симметрия в реальном пространстве [80].

В случае модели Изинга, конкурирующие взаимодействия обычно приводят к бесконечному вырождению. В качестве примера рассмотрим антиферромагнитную модель Изинга на треугольной решетке. На антиферромагнитном треугольнике лучшее, что можно сделать, — это удовлетворить две связи из трех. Любая конфигурация с двумя спинами «вверх» и одним спином «вниз» или двумя спинами «вниз» и одним спином «вверх» на каждом треугольнике минимизирует энергию. Простой способ представить это — посмотреть на треугольную решетку как на центр сотовой решетки (см. рис. 1.1). Таким образом, вырождение основного состояния по крайней мере равно $2^{N/3}$, где N — количество спинов, и существует остаточная энтропия на спин, ограниченный снизу $(1/3) \ln(2)$. На самом деле, остаточная энтропия намного больше, как впервые показал Ванье который вывел точный результат [88].

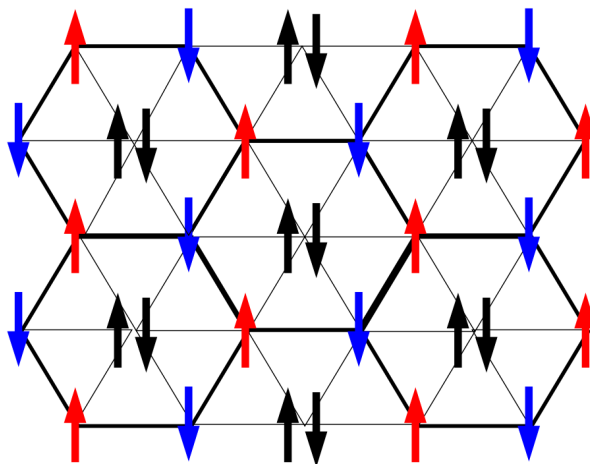


Рис.1.1. Пример фрустрированных состояний на треугольной решетке в антиферромагнитной модели Изинга. Толстые сплошные линии — удовлетворенные антиферромагнитные связи. Черные стрелки — фрустрированные спины.

Таким образом, возникает вырождение основного состояния, поскольку система не может одновременно удовлетворять условию минимизации энергии для всех связей в системе. В этом и заключается явление фрустрации. В таком состоянии система может иметь не нулевую энтропию при нулевой

температуре. Из-за большой энтропии основная энергия фрустрированных систем складывается именно из состояний с минимальной энергией.

Для математического описания эффекта фрустрации можно воспользоваться функцией:

$$\phi_f = J_1 J_2 J_3 / |J|^3, \quad (1.3)$$

где J_i – обменный интеграл.

В общем случае: ($J_{i,j} = \pm J$):

$$\phi_f = \prod_c J_{ij} / |J|, \quad (1.4)$$

где произведение осуществляется по всем связям системы.

Зная J , можно вычислить ϕ_f для элементарных ячеек [82, 83].

В Изинговских моделях с учетом спиновых взаимодействий только лишь J_1 фрустрации не могут возникнуть на классической квадратной решетке и на шестиугольной решетке [89]. При учете первых ближайших соседей фрустрации возникают на треугольных и на Кагоме решетках [90, 91]. Путем подбора величин спиновых обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей и магнитного поля можно добиться возникновения различных случаев фрустрации почти для любых кристаллических решеток [4, 92, 200].

Для модели Гейзенберга часто понятие фрустрации используется, по аналогии с моделью Изинга. При большой конкуренции обменных взаимодействий, для классических спинов основное состояние бесконечно вырождено. Для моделей Гейзенберга это не всегда так. На решетке с одним спином приходящийся на единицу элементарную ячейку, энергия системы может быть сведена к минимуму спиральной структурой. Однако тот факт, что энергия может быть сведена к минимуму с помощью регулярной структуры, не означает, что она единственная. Это хорошо можно наблюдать на таких решетках как квадратная, кагоме и на решетках пирохлора. При переходе через точку фрустрации магнитная структура претерпевает сильные

изменения вплоть до изменения размерности упорядочения. Магнитные моменты могут быть упорядочены вдоль одного направления и разупорядочены вдоль других направлений. Фрустрации существуют только при определенных значениях параметров. Любое отклонение от этих значений, даже сколь угодно малое, может их подавить или они могут быть подавлены при учете дополнительных взаимодействий. Степень фрустрации определяется топологией решетки и сильно зависит от количества состояний в узле и числа взаимодействующих соседей [4].

В спиновых системах, при температурах $T < T_C$, система претерпевает фазовый переход, при котором нарушается условие эргодичности, разделяя фазовое пространство на множество «долин» с бесконечными барьерами свободной энергии. Каждая долина имеет свои некоторые термодинамические параметры и параметр порядка, растущий с понижением температуры. Система остается в точке фазового перехода с нарушением эргодичности при любой температуре ниже T_C , с бесконечно большим количеством метастабильных состояний и барьеров. В то время как некоторые термодинамические величины ведут себя как равновесные, другие зависят от времени, что делает применение традиционных методов статистической механики сомнительными к подобным системам [80].

Свойства фрустрированных систем её термодинамические и магнитные свойства исследуются уже в течении многих лет [86-88]. Изучение геометрически фрустрированных магнетиков началось еще в половине прошлого века. Ванье Грегори Хуг, швейцарский и американский физик-показал, что поведение Изинговского антиферромагнетика на треугольной решетке сильно отличается от поведения антиферромагнетика на квадратной решетке. В случае треугольной решетки не устанавливается магнитный порядок до достижения нулевой температуры [88].

Если говорить про реальные магнетики, где присутствуют эффекты фрустрации, то можно привести бесчисленное количество примеров [86, 87, 88]. Наглядным примером фрустрированных магнетиков являются системы

пирохлора $A_2B_2O_7$. На системах пирохлора $A_2B_2O_7$ проведено множество экспериментальных работ, которые демонстрирует различные уникальные явления, такие как сверхпроводимость, неферми-жидкостное поведение, аномальные эффекты Холла, переходы металл-изолятор, спин-жидкостные состояния [93,94,] связанные с эффектом фрустрации. Оксиды пирохлора могут обладать такими свойствами как спиновый лед в $Ho_2Ti_2O_7$ и $Dy_2Ti_2O_7$ [95,96], спиновое стекло в $Y_2Mo_2O_7$ и $Ho_2Ge_2O_7$ [97, 98, 99] и состоянием спиновой жидкости в $Pr_2Ir_2O_7$ [100,101]. Фрустрированный магнит на основе пирохлора $Nd_2Mo_2O_7$ демонстрирует большой аномальный эффект Холла, приписываемый спиновой хиральности и связанной фазе Берри из-за ориентации спинов в пределе слабого магнитного поля [102].

В настоящее время с большим интересом исследуются свойства фрустрированных магнетиков $Nd_2 B_2 O_7$, где $B = Zr, Hf, Sn, Pb, Mo$ и Ir . В этих магнетиках для температур ниже T_N происходит магнитное упорядочение Nd и температура ФП растет по мере уменьшения ионного радиуса B . Путем замещения ионов B как немагнитными так и магнитными ионами можно уменьшать или увеличивать критическую температуру T_N . Для пирохлора $Nd_2Zr_2O_7$ [103] с немагнитными ионами B критическая температура T_N от 0.4 Кельвин возрастает до 0.91 кельвин для $Nd_2 Sn_2 O_7$ [104]. Уменьшение критической температуры с 10 до 1.8 Кельвин также наблюдается замещением B магнитными ионами для Nd -пирохлоров. Для пирохлора $Nd_2Ir_2O_7$ $T_N = 10$ Кельвин [105] а для $Nd_2 Ru_2 O_7$ $T_N=1.8$ Кельвин [106].

Другой интересный класс фрустрированных магнитов на трехмерных-решетках, представляет собой так называемый гиперкагоме $Na_4 Ir_3 O_8$ с псевдоспином $S = 1/2$ и $PbCuTe_2O_6$ со спином $S = 1/2$ [107]. Эти магнетики демонстрируют поведение квантовой спиновой жидкости с бесщелевыми возбуждениями со спиновой поверхностью Ферми [108, 109]. Однако идеальная реализация истинной квантовой спиновой жидкости во фрустрированных квантовых магнитах далека от реальности из-за дефектов и/или беспорядка в решетке. Микроскопические экспериментальные методы

могут отслеживать такие дефекты и предлагать руководство для улучшения качества образцов в каждом конкретном случае. В настоящее время огромные усилия были приложены для открытия и разработки нового материала Китаева без дефектов. Например, в $H_3 Li Ir_2 O_6$ сотовая плоскость сохраняется не разрушенной, что способствует направленным ферромагнитным взаимодействиям Изинга с ближайшими соседними связями с сильными магнитными фрустрациями, необходимыми для стабилизации состояния квантовой спиновой жидкости с экзотическими возбуждениями [110].

И так фрустрированные системы изучаются самыми разными методами в самых разных областях физики. Несмотря на это строгой и последовательной теории, которая описывала бы свойства трехмерных фрустрированных систем на данный момент не существует.

1.2. Модель Изинга

Изначально представленная модель Изинга для описания ферромагнетизма, стала одной из самых фундаментальных моделей в статистической механике с приложениями в нескольких областях науки (термодинамика, нейронаука, социология, и т.д.).

Микроскопическое представление данной модели можно описать следующим образом. Каждый атом или ион d -мерной решетки обладает магнитным моментом и может рассматриваться как маленький магнит (спин). Для простоты предполагается, что магнитный момент ориентирован в одном из двух возможных и противоположных направлениях (вверх и вниз). Эти маленькие магниты взаимодействуют друг с другом, и два соседних атома предпочитают иметь взаимовыгодное расположение. Сила этих взаимодействий обратно пропорциональна температуре. Также в модели Изинга можно учесть и внешние МП. Тогда ориентация спинов будет выстраиваться с учетом МП и взаимовыгодного расположения спинов друг с другом.

Гамильтониан такой модели можно представить в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (1.5)$$

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

Модель Изинга была введена Вильгельмом Ленцем в 1920 году с целью теоретического понимания пара/ферромагнитного фазового перехода. Модель была названа в честь Эрнста Изинга (ученика Ленца), который изучал и в последующем получил решение одномерной модели Изинга в своей докторской диссертации (1925) [120]. В своей работе он обнаружил, что в одномерной модели Изинга не наблюдается ФП. Он утверждал, что ни в одном измерении не существует ФП. Как потом выяснилось, это утверждение оказалось неверным. Ларс Онсагер получил решение для двумерной квадратной решетки Изинга и показал, что при $T=T_C$ термодинамические свойства системы сильно отличаются от свойств за пределами температуры ФП [120].

Если говорить с точки зрения применимости вычислительной физики к разным моделям Изинга, то имеющееся малое количество точно аналитически решенных моделей Изинга, позволяет оценить эффективность или пригодность методов, основанных на статистическом подходе в том числе Монте-Карло методов. Полученное аналитическое решение Ларсом Онсагером для двумерной модели и результаты, полученные методом МК, имеют расхождение в расчете энергии всего лишь в пределах 1% в области низких и высоких температур [146].

Актуальность использования модели Изинга для описания реальных магнетиков можно объяснить тем, что существует множество классов магнитных Изинго-подобных материалов [146-150]. При наличии большого количества машинного времени на статистических методах и на методе МК можно получить результаты с коль угодно большой точностью.

При учете обменных интегралов вторых и более ближайших соседей, структура фаз и фазовые переходы приобретают намного богатую картину. Выделить зависимость некоторых физических свойств от конкретных параметров системы становится необходимым. Множество работ на моделях Изинга посвящено для разных типов решеток, для разных значений обменных интегралов и дополнительных как внешних, так и внутренних факторов системы [151]. Методами МК модель Изинга также подробно изучается для двухмерных, трехмерных, четырехмерных и даже пятимерных случаев. Все это позволяет нам утверждать, что применение статистических методов к моделям первого приближения является незаменимым аппаратом для изучения как фундаментальных свойств природы ФП, так и прикладных исследований [54].

Трехмерная модель Изинга остается точно не решенным. Для исследования трехмерных моделей Изинга на сегодняшний день один из эффективных методов являются методы вычислительной физики, в частности, МК метод.

1.3. Модель Гейзенберга

Модель Гейзенберга является универсальной моделью и используется для описания упорядоченных магнитных материалов, имеющих не нулевой магнитный момент (спин) при $T < T_C$. В отличие от модели Изинга в модели Гейзенберга спин может ориентироваться в любом пространственном направлении и спин является векторной величиной. С помощью модели Гейзенберга удается хорошо описывать диэлектрические магнитные материалы такие как ферриты-шпинели, ферриты-гранаты, манганиты, оксиды, галогениды переходных металлов и др.

Точное решение для общего случая одномерной модели Гейзенберга была получена в 1971 г. Бакстером. Для получения точного решения Бакстер усовершенствовал методику, полученную в 1931 году Х. Бете и использовал полученные им результаты [152]. Решение двухмерной и трехмерной модели

Гейзенберга крайне затруднительно и на сегодняшний день является вызовом для физиков.

Гамильтониан для классической модели Гейзенберга записывается в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (1.6)$$

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

Еще в 1953г. методом МК для модели Гейзенберга наблюдали сильную зависимость намагниченности от формы частицы без периодических граничных условий. Также наблюдается смещение температуры ФП в зависимости от граничных условий [153]. Также используя метод МК были проведены исследования трехмерных систем Гейзенберговской модели без периодических граничных условий со свободными границами. Была получена корреляция некоторых термодинамических свойств от температурных флуктуаций, магнитных полей, от форм исследуемых моделей, количество спинов в системе и тд. Не малый интерес представляют исследования изучающие эффекты от свободных граничных условий, от расположения спинов относительно поверхностного слоя. Подобные результаты представлены в работе [154].

В научной литературе можно встретить множество исследований классических Гейзенберговских моделей на трехмерных кубических [130] и двухмерных квадратных решетках [158, 159]. Для изучения разных моделей Гейзенберга применяются различные подходы и методики. В работах [160-164] приведено подробное описание Гейзенберговских моделей теоретическими методами и разными способами вычислительной физики.

Для вычисления критических индексов и определения рода ФП в модели Гейзенберга широко применяется так называемый конечно-размерный скейлинг, гистограммный метод анализа данных и кластерные алгоритмы [155, 156]. Установлены некоторые закономерности физических свойств системы в зависимости от линейных размеров с использованием

периодических граничных условий [157]. Результаты полученные на основе метода МК и других приближенных методов не имеют серьезных расхождений.

Модель Гейзенберга с обменными интегралами учитывающие как первые, так и вторые ближайшие соседи в настоящее время широко используется для описания реальных магнитных систем. Трудно найти другую модель, которая описывала бы столь большое множество реальных систем как модель Гейзенберга. При разных значениях обменных взаимодействий J_2 Гейзенберговская модель может быть использована для исследования магнитных свойств самых разнообразных материалов, в том числе и в высокотемпературных оксидных сверхпроводниках на основе Cu [158, 159]. С помощью модели Гейзенберга могут быть описаны монослои на основе элементов *Fe-As*. Сверхпроводники на основе железа обладают исключительными свойствами, такими как: низкая анизотропия, имеют большую критическую плотность тока и выдерживают большое критическое магнитное поле. В работах [11-15] приведены результаты исследований, где для описания свойств сверхпроводников *LaOFeAs* и *BaFe₂As₂* использована модель Гейзенберга.

Модель Гейзенберга используется для изучения свойств систем непосредственно вблизи критической температуры. Благодаря этому были получены новые типы упорядочения системы и новые квантовые состояния.

Подробные исследования на модели Гейзенберга для разных соотношений величин обменных интегралов J_1 и J_2 проведены в [164]. В данной работе показана, что от величина обменных интегралов играет решающую роль в поведении системы вплоть до изменения рода ФП. Также в зависимости от величины обменных интегралов в системе могут реализоваться те или иные магнитные упорядочения, наблюдаться разрушение упорядоченного состояния, образоваться устойчивые спин-жидкостные состояния и другие интересные особенности.

Серьезной проблемой для исследователей при изучении трехмерных моделей Гейзенберга является вывод системы в состояние термодинамического равновесия. Для вывода трехмерных моделей Гейзенберга в состояние термодинамического равновесия требуется много машинного времени. Но и этого не всегда достаточно. Можно потратить сколько угодно много машинного времени и не выйти в состояние равновесия из-за особенностей применяемых алгоритмов и 3-*d* моделей. Исследования трехмерных моделей Гейзенберга требуют реализацию и применение новейших и эффективных алгоритмов для вывода в состояние термодинамического равновесия и стабилизации системы. В трехмерных Гейзенберговских моделях на разных решетках обнаруживаются необычные фазы и свойства характерные для спин-жидкостных состояний. Также интенсивно исследуются трехмерные сильно коррелированные электронные системы с вырожденным состоянием на разных типах кристаллических решеток [165-169].

1.4. Гистограммный метод анализа Монте-Карло данных

Моделирование методом МК уже много лет используется для изучения свойств физических моделей. В 70-х годах XX века идеи, лежащие в основе метода анализа МК данных впервые были сформулированы Джон Валле и Кард. Позже этот метод был дополнен и усовершенствован Ферренбергом и Свенденом. Подробно усовершенствованный метод, который мы будем использовать в данной работе описан в работах [155, 156, 186]. Тем не менее для полноты картины ниже приведем некоторые основные тезисы гистограммного метода анализа МК данных.

Основной проблемой любого тщательного и точного МК исследования является количество необходимых компьютерных ресурсов и машинного времени. Для проведения комплексных вычислений, мощность ЭВМ и эффективность алгоритмов моделирования имеют большое значение.

Необходимость изучать все более крупные и сложные системы вынудило к развитию вычислительных алгоритмов и компьютерного моделирования, направленных на увеличение скорости счета. Такие алгоритмы и методы позволили изучать системы, которые относительно недавно было бы невозможно изучить.

Другой, подход к повышению эффективности заключается в увеличении объема информации, получаемой в результате моделирования. Обычно данные получаемые в результате МК моделирования, представляют собой средние значения термодинамических величин в одной температурной точке, для которой выполняется МК моделирование. В этом параграфе мы рассмотрим легко реализуемый метод, который использует стандартный методы моделирования для создания непрерывных термодинамических функций в некоторой температурной области. Данные, полученные для одного моделирования, могут быть экстраполированы, для изучения всей области вблизи температуры фазового перехода, в то время как при использовании обычных методов такое моделирование требует множества симуляций, для каждой температурной точки отдельно.

Рассматриваемый в этом параграфе гистограммный метод анализа МК данных особенно важен, когда поведение системы демонстрирует резкие максимумы, например, вблизи фазовых переходов первого и второго рода, которые имеют ключевое значение для понимания критического поведения модели. Стандартные методы определяют положение узкого максимума с помощью многократного высокоточного моделирования результатом, которого является набор дискретных точек, ни одна из которых обычно не соответствует точной температуре ФП.

И так, для расчета вероятности значения некоторого рассматриваемого параметра β , контактирующей с тепловой ванной с заданной температурой T , является стандартной задачей статистической механики:

$$\langle \beta \rangle_T = \frac{\sum_i \beta_i \exp(-E_i / (k_B T))}{\sum_i \exp(-E_i / (k_B T))} \quad (1.7)$$

Здесь E_i - энергия, β_i - значение параметра β , связанные i -й конфигурацией, сумма пробегает всевозможные конфигурации равновесной системы.

Ниже приведем краткое описание этого метода. Пусть в рассматриваемой модели, единственным управляющим параметром будет температура T , и мы хотим вычислить зависимость некоторой функции f от энергии E . Для того чтобы вычислить среднее значение $\langle f(E) \rangle$: выполняется моделирование методом МК с использованием любого заданного алгоритма при некотором заданном значении T , который генерирует Q конфигурации с правильной вероятностью, с постоянным значением Больцмана. И наконец измеряется $f(E)$ для каждой конфигурации. Это среднее значение можно взять напрямую или же пройти предварительное построение нормированной гистограммы $w_T(E)$ для энергий, найденных при моделировании. Тогда можно записать:

$$\langle f(E) \rangle_T \approx \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q f(E_q) = \sum_E W_T(E) f(E) \quad (1.8)$$

которая является приближенным значением величины $\beta = f(E)$. Также это уравнение может быть записано как плотность состояний $g(E)$:

$$\langle f(E) \rangle_T = \frac{\sum_E g(E) f(E) \exp(-E/(k_B T))}{\sum_E g(E) \exp(-E/(k_B T))} \quad (1.9)$$

Сравнивая уравнения (1.8) и (1.9) получаем, что $w_T(E)$ пропорциональна $g(E) \exp(-E/(k_B T))$, поэтому уравнение плотности состояний можно аппроксимировать как $g(E) \approx W_T \exp(-E/(k_B T))$. Отметим, что величина $g(E)$ является непосредственно свойством самой системы, не зависящей от значения температуры. Производя аппроксимацию плотности состояний, таким образом полученные данные моделирования распространяются на другие соседние температуры. Если формулу (1.9) записать для другого значения температуры T' , то она будет иметь следующий вид:

$$\langle f(E) \rangle_{r'} = \frac{\sum_E g(E) f(E) \exp(-E/(k_B T'))}{\sum_E g(E) \exp(-E/(k_B T'))} \approx \frac{\sum_E W_T(E) f(E) \exp(E/(k_B T) - E/(k_B T'))}{\sum_E W_T(E) \exp(E/(k_B T) - E/(k_B T'))}, \quad (1.10)$$

что позволяет вычислить значение $\langle f(E) \rangle_{r'}$.

ГЛАВА 2. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО

2.1. Классический метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло является мощным и эффективным инструментом в физике конденсированного состояния. Метод МК используется в самых разных областях физики, химии, биологии, и т.д. В физике этот метод используется в статистической механике, ядерной физике, квантовой физике, молекулярной физике и т.д.

Метод МК — это численный метод, где задача исход которого полностью определен алгоритмом и входными данными заменяется на приближенное решение, основанное на случайных процессах, изначально отсутствующих в задаче. Это позволяет определить такие характеристики системы, которые невозможно измерить экспериментальным и аналитическим методом [56]. Она позволяет решать сложные задачи применяя стохастические алгоритмы и генераторы случайных чисел. Для реализации метода МК необходимо получить последовательность случайных чисел, равномерно распределенных в некотором интервале, например от 0 до 1. Такое распределение случайных чисел можно получить, используя специальные генераторы случайных чисел. Основной задачей генератора случайных чисел является генерация последовательности чисел обладающие хорошим равномерным распределением в заданном диапазоне [56]. На практике в вычислительной физике для решения задач чаще всего используются генераторы псевдослучайных чисел и реже генераторы чисел на основе реальных физических процессов. Идея генераторов псевдослучайных чисел основана на том, что каждое последующее число генерируется на основе предыдущего числа путем некоторых преобразований. Существуют множество классов и типов таких генераторов псевдослучайных чисел: линейные конгруэнтные генераторы (LCG), генератор Фибоначи, генератор Мерсенна, генератор Лемера и т.д. Каждый из таких генераторов имеет свои

достоинства и недостатки. Генераторы случайных чисел, основанные на физических процессах таких как: атмосферные колебания, шумы в электронных устройствах или квантовые процессы соответствуют высоким требованиям к генераторам случайных чисел, но требуют наличие специального оборудования. Тут важным является не обладание большим количеством генераторов случайных чисел, а понимание специфики их работы и подбор генератора с нужными характеристиками под свою задачу или модель.

Недооценённым преимуществом метода МК является то, что можно четко разграничить влияние одних параметров на свойства системы от других. Кроме этого, метод МК позволяет решать задачи, которые не могут быть аналитически решены в виду тех или иных обстоятельств.

В настоящее время точное решение имеют только лишь несколько простейших моделей первого приближения, описывающих фазовый переход второго рода [120], не говоря о более сложных трехмерных моделях. Решение трехмерных моделей аналитическим путем на сегодня крайне затруднительно. Другой известный метод для решения сложных систем с многочисленными условиями и параметрами является метод молекулярного поля [31]. Но в области критических температур данный метод также не позволяет получить адекватные результаты. Также существует ряд других методов таких как: метод высокотемпературного разложения, метод низкотемпературного разложения, эpsilon разложение и другие [53,121 - 124]. В области физики ФП множество результатов получено именно на таких методах. Но все эти методы не эффективны для исследования свойств систем непосредственно вблизи критической температуры. Единственным эффективным и чаще всего используемым методом для решения таких задач пока остается метод МК. Чаще всего целью моделирования является не соответствие экспериментальных результатов с результатами численного эксперимента, а получение полностью контролируемого «эксперимента» для полноты картины физических процессов.

Метод МК впервые для решения уравнения двумерных моделей твердых дисков был применен в 1953 году [125]. В работе [126] авторы одни из первых применили метод МК для исследования $3-d$ систем с потенциалом Леннарда-Джонса.

В методе МК сначала определяются начальные условия системы, причем для определения начального состояния используются случайные числа. Затем рассчитывается состояние системы в новых условиях на основании случайных чисел, т.е. получаем один эволюционный шаг. Далее, после выполнения нужного количества эволюционных шагов происходит усреднение рассчитываемых параметров для вычисления приближенных значений рассматриваемых величин. Таким образом происходит накопление данных, которые можно использовать для оценки необходимых параметров. В МК методе эволюционный шаг системы обычно называют Монте-Карло шагом. Последовательность таких шагов можно рассматривать как временную эволюцию. Это дает нам дополнительную возможность исследовать величины, зависящие от времени и рассматривать динамические критические явления. Также мы можем проводить расчет статистической ошибки. Для вычисления погрешности в методе МК используется предельная теорема. Согласно этой теореме, мы знаем, что сумма большого числа независимых друг от друга и одинаково распределенных случайных величин имеет нормальное распределение. Следовательно, можно провести оценку погрешности, используя стандартное отклонение выборки. Погрешность определенного интеграла, можно вычислить как: $\sqrt{D/N}$, где D – константа, показывающая стандартное отклонение значений функции для всех случайных выборок, N – число МК испытаний [56]. В принципе, методом МК можно получить сколь угодно точные результаты в зависимости от имеющегося в распоряжении машинного времени и соответствующих алгоритмов.

Ниже приведем описание стандартного метода МК. Для описания данной модели в основном будем рассматривать модель Изинга и Гейзенберга,

так как они являются наиболее наглядными примерами дискретной и непрерывной системы. При описании будем следовать работам [125, 126].

Пусть N классических частиц находятся в объеме V , при заданной температуре T . Каждая частица, помеченная индексом i , будет описываться 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:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\vec{x} A(\vec{x}) \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}{\int d\vec{x} \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}, \quad (2.1)$$

где интеграл берется по всему фазовому пространству. Если множество $\{\alpha_i\}$ принимает дискретные значения, то среднее $A(\vec{x})$ вычисляется как:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_k A(\vec{x}_k) \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}{\sum_k \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}, \quad (2.2)$$

Интегралы типа (2.1), можно вычислить стандартными способами, или напрямую случайным образом выбирая точки \vec{x}_v в фазовом пространстве [125]. Но надо 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 меняться на многие порядки, особенно при температурах близких к критическим. Использованный Метрополисом и др. в [125], вариант метода МК, основан на более практичном способе. В этом случае точки фазового пространства выбираются не случайно, а с предпочтительной выборкой дающий преимущественно вклад в сумму (2.1). Это равнозначно выбору состояний \vec{x}_v в соответствии с некоторой плотностью вероятности $P(\vec{x}_v)$:

$$P(\vec{x}_v) = \frac{\exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1} \exp(-H(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (2.3)$$

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

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v) P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1}^M P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (2.4)$$

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

$$P(\vec{x}_v) = P_{eq}(\vec{x}) \sim \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T), \quad (2.5)$$

при котором (2.4) превращается в среднее арифметическое

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v), \quad (2.6)$$

где M -общее число состояний, выработанных в Монте-Карло процессе. Но нужно иметь в виду, что в реальных случаях точное выражение для $P_{eq}(\vec{x}_v)$ неизвестно. Можно организовать случайное блуждание $\{\vec{x}_v\}$ в фазовом пространстве с помощью Марковского процесса так, чтобы $P(\{\vec{x}_v\})$ сходилось $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$ 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 выполнение принципа детального равновесия:

$$P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}) \cdot W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v). \quad (2.7)$$

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

$$1. \quad \sum_{v'} W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = 1, \quad \text{для всех } v; \quad (2.8)$$

$$2. \quad W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) > 0, \quad (2.9)$$

$$3. \quad \sum_{\nu} P_{eq}(\bar{x}_{\nu}) \cdot W(\bar{x}_{\nu} \rightarrow \bar{x}_{\nu'}) = P_{eq}(\bar{x}_{\nu'}), \quad \text{для всех } \nu'. \quad (2.10)$$

При соблюдении условий (2.8) - (2.10) выполнение уравнения (2.7) означает, что отношение переходных вероятностей зависит только от изменения энергии $\delta H = H_N(\bar{x}_{\nu'}) - H_N(\bar{x}_{\nu})$ при переходе из состояния \bar{x}_{ν} в состояние $\bar{x}_{\nu'}$

$$\frac{W(\bar{x}_{\nu} \rightarrow \bar{x}_{\nu'})}{W(\bar{x}_{\nu'} \rightarrow \bar{x}_{\nu})} = \exp(-\delta H / k_B T). \quad (2.11)$$

Выражение (2.11) все еще оставляет произвол в выборе W . На практике чаще всего используются следующие две функции [56]:

$$W(\bar{x}_{\nu} \rightarrow \bar{x}_{\nu'}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\delta H / k_B T), & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \delta H \leq 0 \end{cases}, \quad (2.12)$$

или

$$W(\bar{x}_{\nu} \rightarrow \bar{x}_{\nu'}) = \frac{1}{2\tau} \left(1 - \text{th} \left(\frac{\delta H}{2k_B T} \right) \right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\delta H / k_B T)}{1 + \exp(-\delta H / k_B T)}, \quad (2.13)$$

где τ – произвольный параметр.

Рассмотрим несколько вопросов, связанных с практической реализацией схемы (2.12, 2.13) и перехода из состояния ν в состояние ν' .

В данном методе МК от реализуемой модели сильно зависит выбор последовательных конфигураций ν и ν' . Для модели с дискретными степенями свободы переход в новую конфигурацию заключается в выборе одного из возможных состояний для одной из переменных. Например, в модели Изинга $\alpha_{\nu'} = -\alpha_{\nu}$. В таких моделях с непрерывной симметрией, как XY - модель, или классическая модель Гейзенберга, конфигурационное пространство $\{\alpha_{\nu}\}$ представляет собой совокупность ориентаций единичных векторов (спинов). А для модели Гейзенберга мы имеем $\alpha_{\nu} \equiv (\theta, \varphi)$. В таком случае один шаг Марковской цепи заключается в попытке переворота какого-либо спина в узле решетки, на некоторый случайный угол. Выбор спина для поворота

осуществляется или 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 Монте-Карло шаг на спин (МК шаг/спин). Для выбора в пространстве нового случайного направления используются формулы:

$$\cos\theta = 2\xi_1 - 1, \quad \varphi = 2\pi \cdot \xi_2, \quad (2.14)$$

где $0 \leq \theta < \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, θ и φ - углы в сферической системе координат; ξ_1 и ξ_2 – случайные числа, равномерно распределенные в интервале (0, 1). Для XY модели выбор нового направления осуществляется на плоскости $\varphi = 2\pi\xi_1$. Часто целесообразно выбирать новую степень свободы не полностью случайным образом, а из интервала вблизи предыдущего значения. Этот интервал затем может быть подобран таким образом, чтобы средняя скорость переходов была оптимальной. Тогда:

$$\varphi'_v = \varphi_v + \Delta\varphi(2\xi - 1). \quad (2.15)$$

Не редко необходимо бывает выбирать точки в фазовом пространстве неравномерно, а в соответствии с определенной закономерностью. Для решения проблем такого рода конструируется алгоритм, который генерирует φ'_v пропорционально распределению вероятности $P(\varphi_v) \sim \exp[-V(\varphi_i)/k_B T]$ [56].

Существует множество вариантов перехода из \bar{x}_v в \bar{x}'_v . Гибкость метода МК позволяет определить последовательность конфигураций под собственные задачи исследователя в зависимости от типа задачи для решения самых разных проблем.

Здесь же коснемся вопроса о выборе начальной конфигурации системы. Начальное состояние системы иногда очень важен с точки зрения эффективности расчетов и ошибок метода МК. Обычно задают случайную начальную конфигурацию, или упорядоченную по какому-либо принципу. При этом надо учесть, что выбор конкретного вида начальной конфигурации может в значительной мере влиять на времена релаксации моделируемых

систем. Этот вопрос становится особенно актуальным для систем, где конфигурации почти «заморожены», например, для спиновых стекол или моделей, которые претерпевают фазовый переход без появления дальнего порядка, но с расходящейся восприимчивостью (XY-модель) [128]. Поэтому, наличие предварительной информации о статистических свойствах изучаемой модели может значительно облегчить решение вопроса о выборе начальной конфигурации. Если обладать неограниченным «машинным временем», можно задать любую начальную конфигурацию.

2.2. Алгоритм Метрополиса

Моделирование методом Монте-Карло на ЭВМ является одним из основополагающих методов статистической физики на протяжении многих лет, особенно в изучении фазовых переходов и критических явлений [125].

В этом параграфе мы рассмотрим метод, позволяющий сократить время счета на ЭВМ, предназначенный для расчета свойств систем, состоящая из взаимодействующих между собой частиц. Взаимодействие частиц друг с другом считается сферически симметричным. Метод не предполагает каких-либо ограничений температурного диапазона или количества частиц. Чтобы можно было провести реальный численный эксперимент на ЭВМ, конечно, задается только конечное число частиц. Но чтобы исключить поверхностные эффекты, к системе применяются периодические граничные условия [125].

При вычислении интегралов в фазовом пространстве в классическом методе МК приходится рассматривать огромное количество расчетных точек с очень малыми весовыми коэффициентами. Это приводит к росту времени расчета, особенно в температурах близким к критическим.

Последовательность вычисления средних значений исследуемых параметров в алгоритме Метрополиса следующая: выбирается случайная частица в системе, меняется состояние данной частицы и сравниваются значения энергий системы до изменения частицы и после. Если данное

изменение приводит к понижению энергии системы или оно выгодно, то новое состояние принимается. Если новое состояние не выгодно или приводит к повышению энергии системы то новое состояние принимается с определенной вероятностью равной: $\exp(-\Delta E / k_B T)$, т.е.

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min\left(\frac{P(E_i)}{P(E_j)}, 1\right) \quad (2.16)$$

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

$$P(E_i) = \min\left(\frac{e^{-E_i/k_B T}}{Z}, 1\right) \quad (2.17)$$

Объединив уравнения (2.16) и (2.17), получим:

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min\left(\frac{e^{-E_j/k_B T}}{e^{-E_i/k_B T}}, 1\right) = \min\left(\exp\left[-\frac{E_j - E_i}{k_B T}\right], 1\right) = \min\left(\exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right], 1\right) \quad (2.18)$$

где ΔE - изменение энергии системы в результате смены конфигурации, T – абсолютная температура. Если новое состояние не принимается, то осуществляется возврат к предыдущему состоянию. Среднее значение интересующей характеристики по данному алгоритму находится как среднее арифметическое из полученных значений данной характеристики по всей последовательности состояний:

$$F = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F_j \quad (2.19)$$

где F_j - интересующая нас величина на j -й итерации. Определенное таким образом среднее значение является также средним по равновесному распределению [125].

Сходимость алгоритма достигается путем выполнения большого числа шагов до момента, пока среднеквадратичное отклонение не достигнет определенного минимального заданного значения, устанавливаемого исследователем индивидуально. С учетом имеющихся вычислительных

возможностей и задачи минимальное допустимое отклонение устанавливается индивидуально.

Не смотря на простоту и распространённость, алгоритм Метрополиса имеет серьёзный недостаток при исследовании сложных систем с дополнительными взаимодействиями. При температуре близкой к температуре фазового перехода происходит так называемое замедление алгоритма. В температурах близким к критическим число шагов, необходимое для достижения сходимости, возрастает экспоненциально, что приводит к снижению эффективности алгоритма. Поэтому для систем с большим количеством локальных минимумов энергии (например, фрустрированные магнитные системы) был предложен репличный обменный алгоритм метода МК [117, 122, 129].

2.3. Репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло

Методы МК являются незаменимым инструментом для изучения классических систем. Об этом свидетельствуют многочисленные исследования, выполненные этими методами [37, 130-133]. Однако вблизи критической точки эффективность метода резко падает, и мы сталкиваемся с так называемой проблемой «критического замедления». Критическое замедление является одним из наиболее серьёзных источников трудностей при исследовании ФП и критических явлений методами МК.

Согласно современным представлениям теории ФП и критических явлений, время релаксации системы в точке фазового перехода T_c расходится как:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (2.20)$$

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

Для многих моделей характерное значение $z \approx 2$ [1, 2]. 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 фазовых переходов второго рода. Эта неэффективность обусловлена тем, что в алгоритме Метрополиса, Монте-Карло испытание заключается в попытке переворота одного спина, тогда как эффекты, связанные с фазовыми переходами обусловлены флуктуациями спиновых кластеров больших размеров.

Для систем с конечными размерами, используемых при компьютерном моделировании, размеры спиновых кластеров ограничены размерами самой системы L [55]. В этом случае при $T = T_c$:

$$\tau \sim L^z. \quad (2.21)$$

В настоящее время предложен ряд новых алгоритмов для метода МК, позволяющих в той или иной мере преодолеть проблему критического замедления [134-144]. Имеется также ряд других подходов, в которых используются и различные гибридные алгоритмы, направленные на преодоление конкретных частных проблем [71-78, 145].

Из всех этих алгоритмов наиболее эффективным, для исследования спиновых систем с конкурирующими обменными взаимодействиями, считается репличный обменный алгоритм метода МК. Об этом свидетельствуют исследования спиновых стекол и молекулярных белковых соединений, проведенные на основе этого алгоритма [111, 140, 141].

В этом параграфе мы рассмотрим новый подход метода МК, который обеспечивает быстрое время релаксации, что делает возможным исследование равновесных свойств с относительно большими линейными размерами за относительно малое время. При построении Марковского процесса для МК моделирования должны быть выполнены два условия: последовательность переходов с ненулевой вероятностью должна соединять любые две конфигурации и должно выполняться условие детального равновесия. Стандартный алгоритм Метрополиса метода МК удовлетворяет обоим

условиям, гарантируя, что равновесие в конечном итоге будет достигнуто. Данный алгоритм также удовлетворяет первому условию и обеспечивает быстрый процесс релаксации локальных флуктуаций. Затем вводится дополнительное условие, удовлетворяющие условию детального равновесия, для уменьшения времени релаксации. Данный алгоритм оказался весьма эффективным для исследования сложных систем с многочисленными дополнительными взаимодействиями [140,141].

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:

$$\begin{cases} i = i(m) \equiv f(m), \\ m = m(i) \equiv f^{-1}(i), \end{cases} \quad (2.22)$$

где $f(m)$ - функция перестановки m , $f^{-1}(i)$ её 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 [111]:

$$x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m. \quad (2.23)$$

Поскольку реплики не взаимодействуют между собой, то вероятность для состояния X в этом обобщенном ансамбле пропорциональна Больцмановскому фактору для каждой реплики [111]:

$$W(X) = \exp\left\{-\sum_{i=1}^M \beta_{m(i)} H(q^{[i]}, p^{[i]})\right\} = \exp\left\{-\sum_{m=1}^M \beta_m H(q^{[i(m)]}, p^{[i(m)]})\right\}, \quad (2.24)$$

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

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

$$X = \{\dots, x_m^{[i]}, \dots, x_n^{[j]}, \dots\} \rightarrow X' = \{\dots, x_m^{[j]}, \dots, x_n^{[i]}, \dots\}. \quad (2.25)$$

Здесь i, j, m и n связаны функциями перестановки в формуле (2.22), и обмен реплик представляет новую функцию перестановки f' :

$$\begin{cases} i = f(m) \rightarrow j = f'(m), \\ j = f(n) \rightarrow i = f'(n). \end{cases} \quad (2.26)$$

Более подробно обмен между репликами можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_m^{[j]'} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]'})_m \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_n^{[i]'} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]'})_n \end{cases}, \quad (2.27)$$

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 [111]:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_n^{[i]'} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]'})_n \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_m^{[j]'} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]'})_m \end{cases}. \quad (2.28)$$

В первоначальной вариации репличного обменного алгоритма [71, 72], используемый в методе МК учитывались только координаты q (и функцию потенциальной энергии $E(q)$). Этот алгоритм в молекулярной динамике имеет дело и с импульсом p , который определяется следующим образом [111]:

$$\begin{cases} p^{[i]'} \equiv \sqrt{\frac{T_n}{T_m}} p^{[i]} \\ p^{[j]'} \equiv \sqrt{\frac{T_m}{T_n}} p^{[j]} \end{cases}. \quad (2.29)$$

Для сходимости к распределению равновесия, для этого обменного процесса, достаточно наложить условие детального баланса на вероятность перехода $w(X \rightarrow X')$ [111]:

$$W(X)w(X \rightarrow X') = W(X')w(X' \rightarrow X). \quad (2.30)$$

Отсюда следует:

$$\frac{w(X \rightarrow X')}{w(X' \rightarrow X)} = \exp(-\Delta), \quad (2.31)$$

где

$$\Delta \equiv (\beta_n - \beta_m)(E(q^{[i]}) - E(q^{[j]})), \quad (2.32)$$

и i, j, m и n связаны функциями перестановки (формула (2.22)) перед обменом [111]:

$$\begin{cases} i = f(m) \\ j = f(n) \end{cases} \quad (2.33)$$

В соответствии со схемой Метрополиса обмен осуществляется следующим образом [37]:

$$w(X \rightarrow X') \equiv w(x_m^{[i]} | x_n^{[j]}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

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

Тогда схема репличного обменного алгоритма метода МК, представляет собой поочередное выполнение следующих двух шагов [77]:

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 обмениваются с вероятностью $w(x_m^{[i]} | x_{m+1}^{[j]})$.

Этот метод моделирования хорошо подходит для параллельных вычислений на процессоре или видеокарте.

Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными алгоритмами обобщенного ансамбля, таких как мультиканонический алгоритм в том, что вероятность обмена заранее известна, тогда как для последних алгоритмов вероятность определяется трудно и отнимает много времени [111, 144].

В рассмотренном алгоритме метода МК каждая реплики блуждает в определенном температурном интервале, благодаря чему происходит случайное блуждание в поле некоторой потенциальной энергии. Это позволяет решить проблему застревания системы в локальном минимуме энергии. Для увеличения эффективности этого метода требуется увеличение числа реплик, что требует больших компьютерных мощностей для

моделирования сложных систем [111]. Но в конечном счете время вычислений при наличии тех или иных мощностях ЭВМ репличный алгоритм позволяет сэкономить время. Репличный алгоритм является наиболее последовательным и специализированным для исследования ФП, термодинамических и магнитных свойств сложных спиновых систем с конкурирующими взаимодействиями.

ГЛАВА 3. АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

3.1. Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в антиферромагнитной фазе 2-го типа

Учет антиферромагнитных взаимодействий ближайших соседей и следующих ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга приводит к вырождению основного состояния, появлению различных фаз, ФП и аномалий критических свойств [187]. Поэтому в данной работе исследован характер и особенности ФП в антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей при наличии внешнего магнитного поля. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическими свойствами спиновых систем с конкурирующими взаимодействиями.

В данной главе диссертации, предпринята попытка на основе специального репличного алгоритма метода МК исследовать ФП и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом конкурирующих взаимодействий и магнитного поля.

Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде:

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

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин, J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей соответственно, h – величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). Магнитное поле

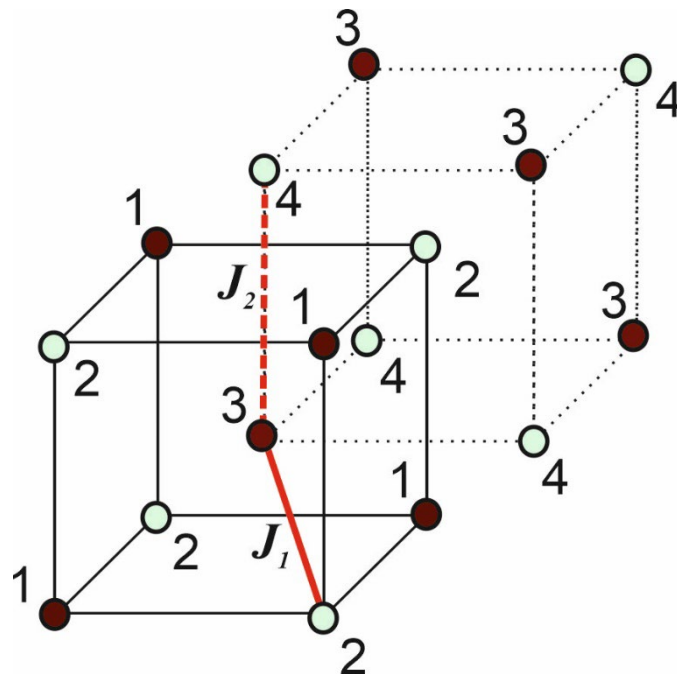


Рис. 3.1. Схематическое изображение объемно-центрированной кубической решетки.

менялось в интервале $0.0 \leq h \leq 18.0$. В данной работе будет использоваться параметр $k = J_2/J_1$ - соотношение обменных взаимодействий вторых ближайших соседей к первым. В данном параграфе главы рассмотрим результаты исследований при $J_2 = J_1 = -1.0$, $k = 1$.

В исследуемой модели на ОЦК решетке сосуществуют 4 подрешетки. Схематически данная модель представлена на рис. 3.1. На этом рисунке цифрами 1–4 обозначены все подрешетки системы. Число рядом со спином указывает номер подрешетки. Темный кружок – спин направлен «вверх», светлый кружок – спин направлен «вниз».

Теоретические и численные исследования модели Изинга на разных типах решеток и с конкуренцией обменных взаимодействий были проведены в работах [173-193]. В работе [194] для квантовой антиферромагнитной модели Изинга получены общие аналитические выражения для фрустрационного поля и показано, что внешнее МП сильно влияет на физические свойства данной антиферромагнитной модели. Исследования на основе метода МК для модели Изинга на ОЦК решетке при разных значениях k , проведены в работе [188]. Получена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от взаимодействия вторых ближайших соседей и

определен род ФП для всех значений k как ФП 2 рода. В работе [192] для данной модели рассчитаны значения всех основных статических критических индексов и установлены особенности критического поведения в зависимости от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. В антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей для соотношения обменных взаимодействий $k=1$ без МП было показано, что ФП из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу происходит как ФП 2 рода. Позднее для этой же модели была обнаружена область значений $2/3 < k \leq 0.75$ где реализуется ФП 1 рода [189].

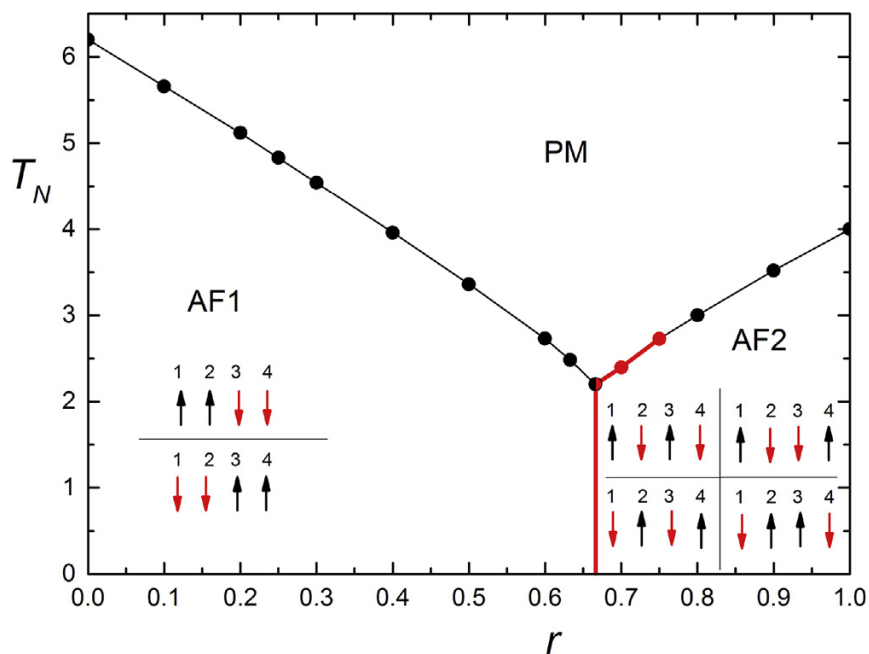


Рис. 3.2. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от следующих ближайших соседей.

На рисунке 3.2. приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей без учета МП. На рисунке вместо используемого в диссертации обозначения k используется r . Красные точки соответствуют точкам ФП 1 рода, черные – ФП 2 рода. Как показано на рисунке, в точке $k = 2/3$ пересекаются три различные фазы: AF1 – антиферромагнетик 1-го типа, PM – парамагнетик и AF2 – антиферромагнетик 2-типа [62, 70, 199]. Черные и красные стрелки

обозначают направления спинов в подрешетках. Структура антиферромагнитного упорядочения 2-го типа - AF2 представляет собой две взаимопроникающие кубические решетки, каждая из которых имеет антиферромагнитное упорядочение. При антиферромагнитном упорядочении 1-го типа - AF1 каждый спин имеет восемь ближайших соседей с антипараллельным упорядочением, а шесть следующих ближайших соседей упорядочены параллельно [70, 189]. Как видно из этой диаграммы, в антиферромагнитной фазе AF1 может быть реализовано только две структуры основного состояния. В антиферромагнитной фазе 2-го типа AF2 реализуются четыре структуры основного состояния. Вдоль вертикальной красной линии соответствующие значению $k = 2/3$, все шесть структур сосуществуют одновременно [189].

В этой главе мы рассмотрим полученные нами результаты по исследованию влияния внешнего МП на ФП и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке для трех случаев, при:

$k = 1$, где происходит ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы 2-го типа AF2 в парамагнитную фазу (рис 3.1, $r=1$);

$k = 2/3$, где пересекаются все три фазы и происходит ФП 2 из антиферромагнитной фазы в парамагнитную (рис 3.1, $r=2/3$);

$k = 0.5$, где наблюдается ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы 1-го типа в парамагнитную фазу (рис 3.1, $r=0.5$).

Исследование ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых проблем. В диссертационной работе и в последующих параграфах данной главы использовался высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло [111, 179, 195].

Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности не очень эффективно и отнимает много времени. Этот метод нами был апробирован для исследования других более простых моделей [6, 147, 196]. Кроме того,

репличный обменный алгоритм облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией.

Расчёты проводились с использованием периодических граничных условий и линейными размерами $L=8\div 60$, $L\times L\times L\times 2=N$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки, N —количество спинов в системе. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 2.5\cdot 10^4$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка для тестовой модели. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 20\tau_0$ МК шагов на спин.

Для построения графиков зависимости теплоемкости от температуры использовалось выражение [197]:

$$C = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right) \quad (3.2)$$

Намагниченность вычислялась по формуле:

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\langle i \rangle} S_i \quad (3.3)$$

Для определения критической температуры T_N и анализа природы ФП был использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [197, 198]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2} \quad (3.4)$$

где M —намагниченность системы с линейными размерами L . В случае ФП 2 рода кривые кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения и эта точка является критической точкой [197, 198]. Этот метод позволяет определить T_c с большой точностью. В данной работе, на исследуемых моделях, нами продемонстрирована высокая эффективность этого метода.

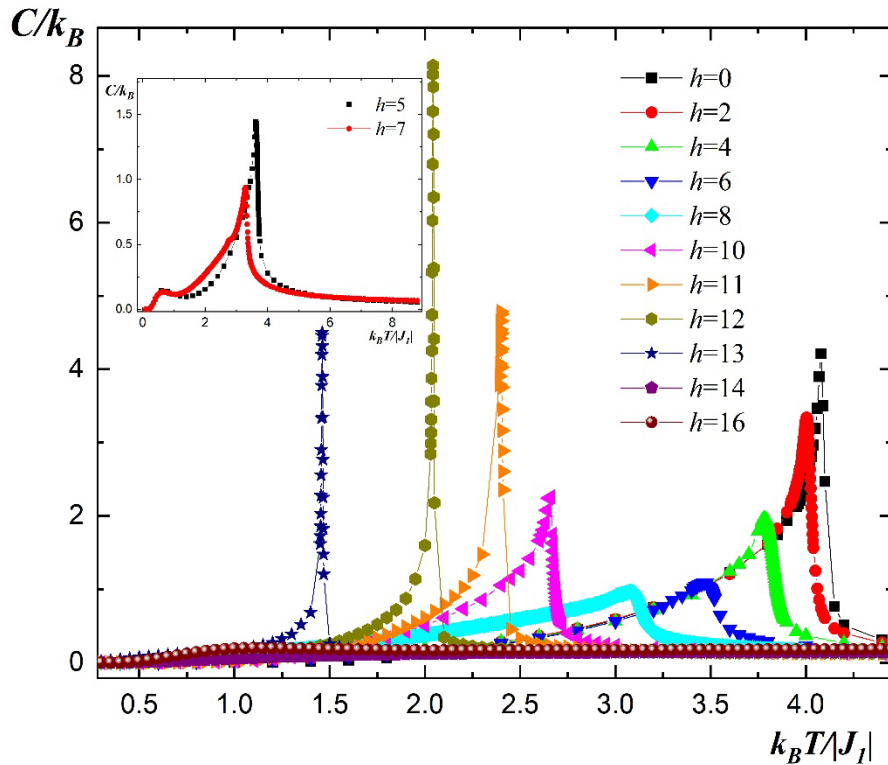


Рис. 3.3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_1|$ для разных значений h .

На рисунке 3.3 показаны температурные зависимости теплоемкости при $L=24$ для разных значений величины МП. На рисунке видно, что в интервале МП $0.0 \leq h \leq 14.0$ с увеличением значения h наблюдается сдвиг максимумов теплоемкости в сторону низких температур. Сдвиг максимумов теплоемкости в сторону более низких температур обусловлен конкуренцией внутренних обменных взаимодействий и внешнего магнитного поля. Обменные взаимодействия пытаются выстроить антиферромагнитное упорядочение, а внешнее магнитное поле упорядочение по направлению поля. В результате этого при увеличении внешнего МП происходит усиление конкурирующих взаимодействий система становится восприимчивой при более низких температурах. Также заметно, что рост значения МП сначала подавляет флуктуации при ФП и максимум теплоемкости сначала уменьшается, а затем увеличивается. Можно заметить, что для значений магнитного поля $11.0 \leq h \leq 13.0$ в критической области наблюдаются более ярко выраженные максимумы. Такие резкие максимумы обычно характерны для ФП первого рода. Можно предположить, что для этих значений полей в системе происходит ФП первого

рода. Для некоторых значений полей, вставка в рисунке 3.3, в низкотемпературной области наблюдаются небольшие вторые максимумы. Наличие двойных максимумов связано с промежуточной частично неупорядоченной антиферромагнитной фазой. При значениях поля $h > 14$

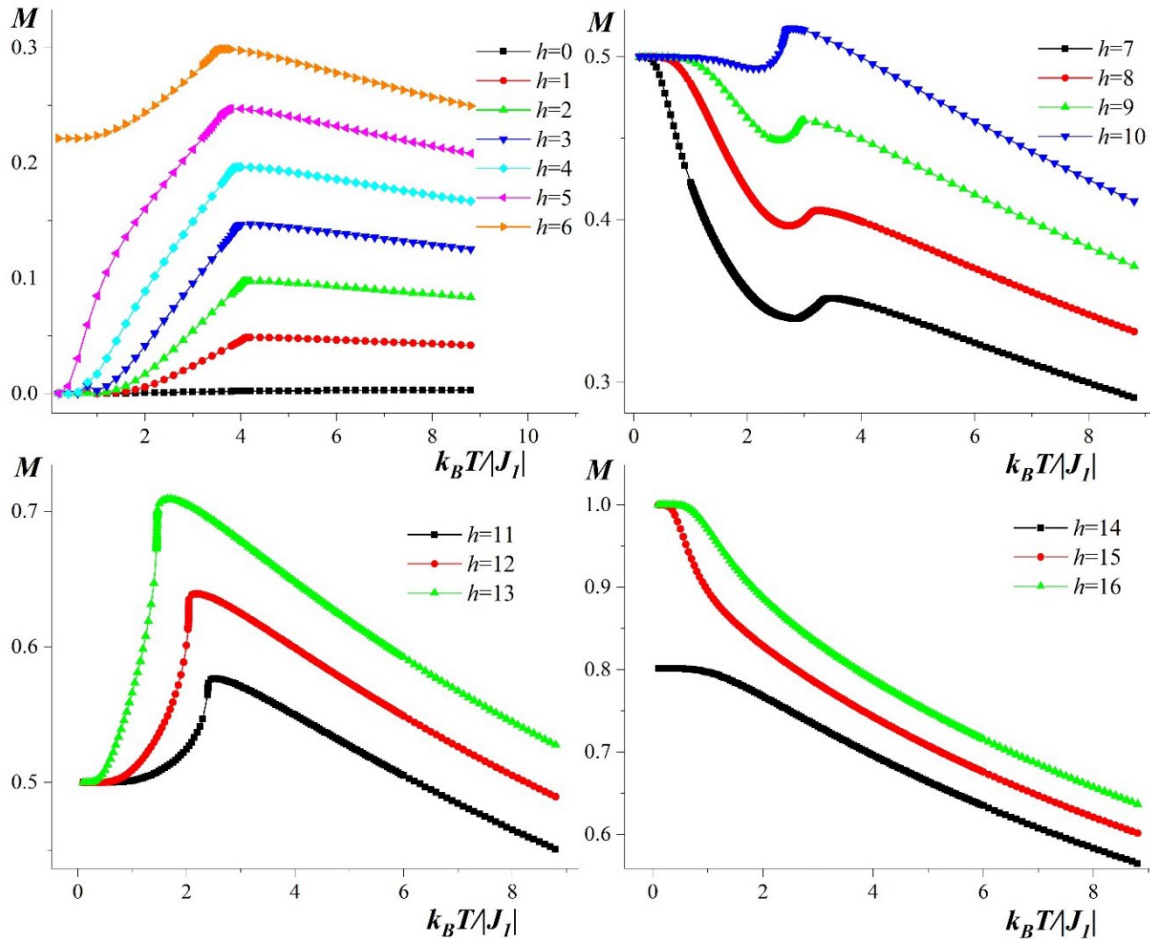


Рис. 3.4. Зависимости намагниченности M от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h .

максимум теплоемкости исчезает. Можно предположить, что при высоких значениях внешнее магнитное поле подавляет ФП.

Температурные зависимости намагниченности для различных значений h приведены на рисунке 3.4. Для нулевого значения магнитного поля, как и ожидалось намагниченность равна нулю. При наличии внешнего МП намагниченность в области низких температур имеет ненулевые значения. Рассматриваемая система как мы уже указывали имеет магнитные подрешетки, связанные с симметрией решетки. При значениях МП $0.0 \leq h \leq 5.0$ система имеет антиферромагнитное упорядочение. Температурные

флуктуации нарушают антиферромагнитное упорядочение и МП выстраивает спины вдоль одного направления что приводит к росту намагниченности. При повышении температуры для значений магнитного поля $h=7; 8; 9$ и 10 с ростом температуры мы наблюдаем сначала спады намагниченности потом рост до температуры ФП. Возможно, это связано с тем, что система в низкотемпературной области находится в ферримагнитном состоянии и рост температуры нарушает ферримагнитное состояние в пользу антиферромагнитного. Дальнейшее увеличение температуры из антиферромагнитного состояния ведет к росту намагниченности до температуры ФП. При бóльших значениях МП $h=11, 12$ и 13 рост намагниченности с увеличением температуры связан с тем, что температурные флуктуации нарушают ферримагнитное упорядочение в пользу ферромагнитного. В промежуточных значениях МП $h=6$ и 14 система в основном состоянии частично разупорядочена. В случае $h=6$ система находится в промежуточном антиферромагнитном и ферримагнитном упорядочении. В случае $h=12$ в системе нарушено ферримагнитное упорядочение, но все еще не достигла ферромагнитного состояния. При более высоких МП $h=15$ и 16 система упорядочена ферромагнитно при температурах близких к нулю (рис 3.4).

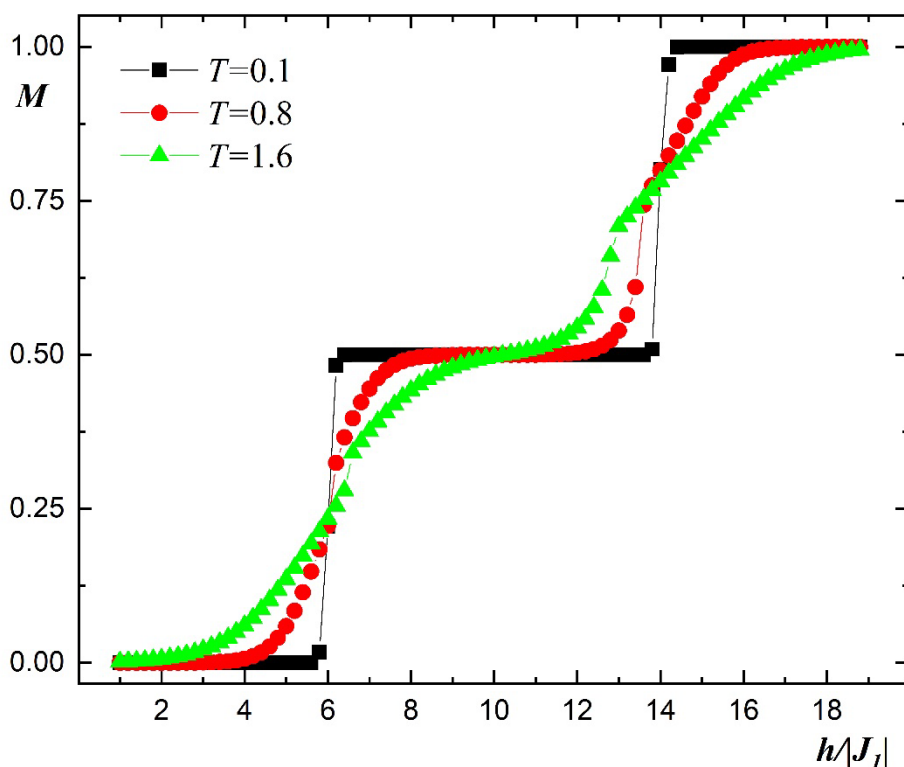


Рис. 3.5. Зависимость намагниченности M от магнитного поля $h/|J_I|$ для разных значений температур.

Более наглядно описанное выше поведение системы можно продемонстрировать на полевых зависимостях намагниченности. На рисунке 3.5 представлены зависимости намагниченности от МП для разных температур. На рисунке наблюдается плато намагниченности, которое приходится на $M=0$, $M=1/2$, $M=1$ намагниченности насыщения. В области значений магнитного поля $0.0 \leq h < 6.0$ спины двух подрешеток направлены вдоль внешнего поля, а двух оставшихся подрешеток - против поля т.е. в система упорядочена антиферромагнитно. Такое упорядочение подрешеток приводит к тому, что намагниченность всей системы становится равной нулю. При значении поля $6.0 < h < 14.0$, еще одна подрешетка поворачивается вдоль направления поля. Спины трех подрешеток направлены вдоль внешнего поля, а спины одной подрешетки - против поля. Система находится в ферримагнитном упорядочении. Этим обусловлено появление плато намагниченности равное $1/2$ намагниченности насыщения (рис 3.5). При сильных магнитных полях ($h > 14.0$) все четыре подрешетки ориентируются вдоль поля, что приводит к максимальному насыщению намагниченности. В

основном состоянии для значения МП $h=6$ система частично разупорядочена. Поэтому при данном значении поля намагниченность примерно равна $M \sim 0.25$. Аналогично и для значения магнитного поля $h=14$ система разупорядочена и намагниченность равна $M \sim 0.75$. С увеличением температуры плато постепенно исчезает и наблюдается более плавный рост намагниченности. Это объясняется тепловыми флуктуациями спинов.

Все три участка МП, соответствующим различным упорядочениям системы, можно увидеть и на зависимости минимальной энергии E_{min} системы от величины МП. Минимальная энергия E_{min} – энергия реплики с минимальной

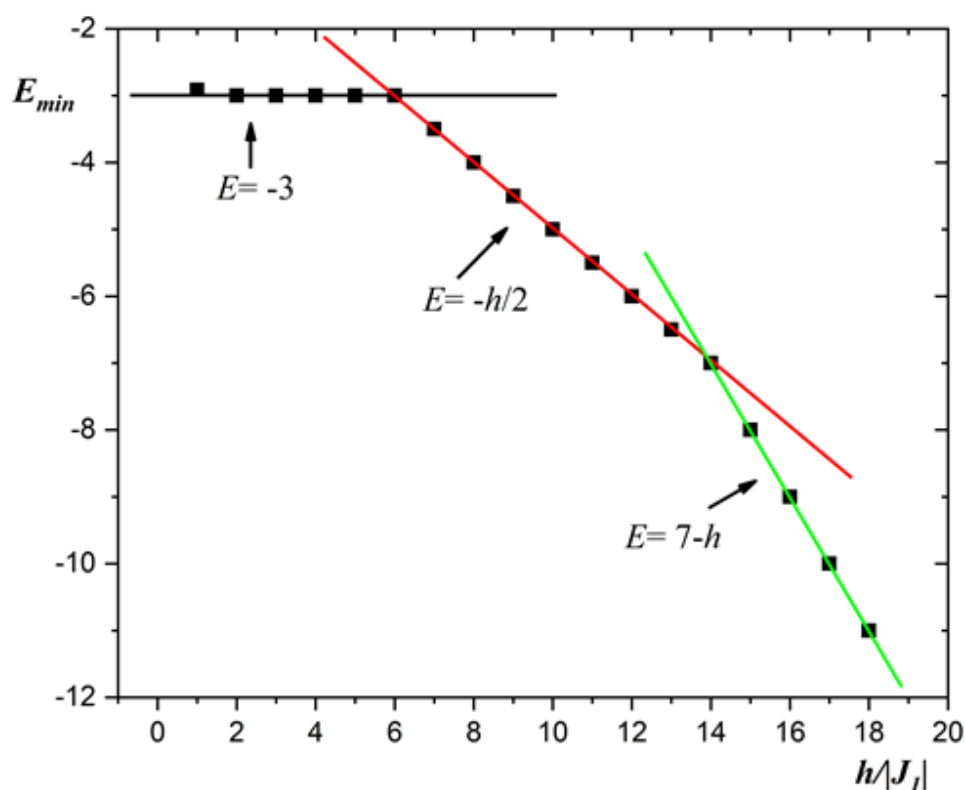


Рис. 3.6. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля $h/|J_1|$.

температурой $T=0.1$. На рисунке 3.6 мы наблюдаем три разные области зависимости энергии от магнитного поля. В первой области ($0.0 \leq h \leq 6.0$), где наблюдается антиферромагнитное упорядочение, энергия системы не зависит от величины МП. Во второй области ($6.0 \leq h \leq 14.0$) наблюдается медленный спад энергии с увеличением МП. В этой области происходит частичное разрушение антиферромагнитного упорядочения в пользу ферромагнитного.

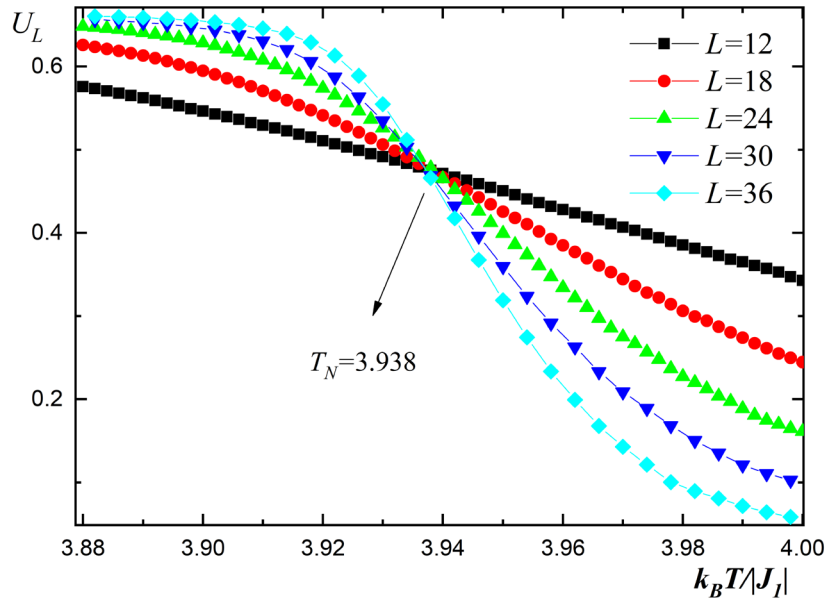


Рис. 3.7. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=3.0$.

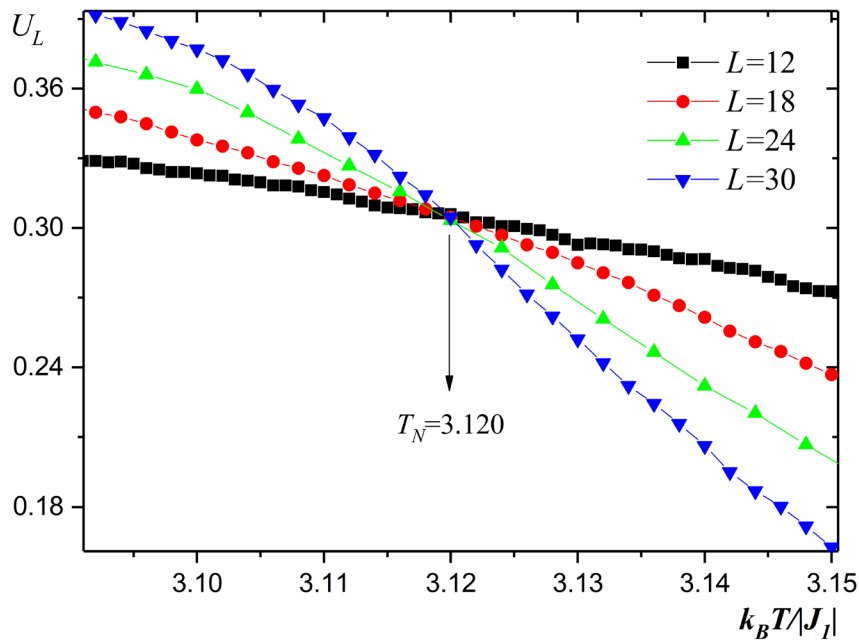


Рис. 3.8. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=8.0$.

В третьей области ($14.0 \leq h \leq 18.0$), где наблюдается полное ферромагнитное упорядочение системы мы наблюдаем более резкий спад энергии от поля.

Выражение (3.4) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью.

Известно, что в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [197, 198].

На рис. 3.7 и 3.8. представлены зависимости кумулянта Биндера четвертого порядка U_L для разных размеров системы L при значении магнитного поля $h=3.0$ и $h=8.0$ соответственно. На рисунках видна отчетливая точка пересечения кривых, которая свидетельствует о том, что в системе реализуется ФП второго рода, а сама точка является критической температурой. Аналогичные зависимости кумулянтов Биндера были построены для всех значений магнитного поля в интервале $0.0 \leq h \leq 10.0$. Анализ наших результатов показывает, что в интервале $0.0 \leq h \leq 10.0$ наблюдается ФП второго рода. В интервале $11.0 \leq h \leq 14.0$ на зависимостях кумулянтов Биндера не удалось обнаружить точки пересечения. Это затрудняет определение критической температуры и проведение анализа ФП в данном интервале поля.

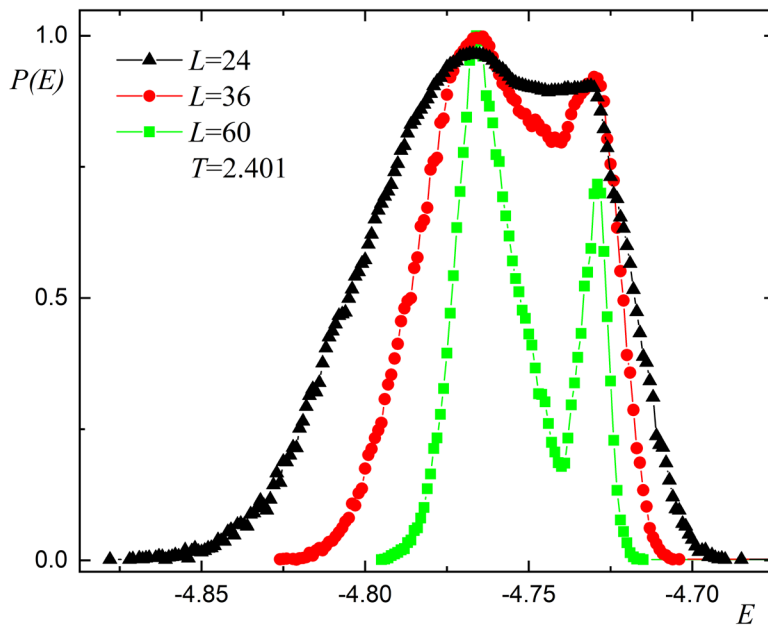


Рис. 3.9. Гистограммы распределения энергии при $h=11.0$. для разных линейных размеров L

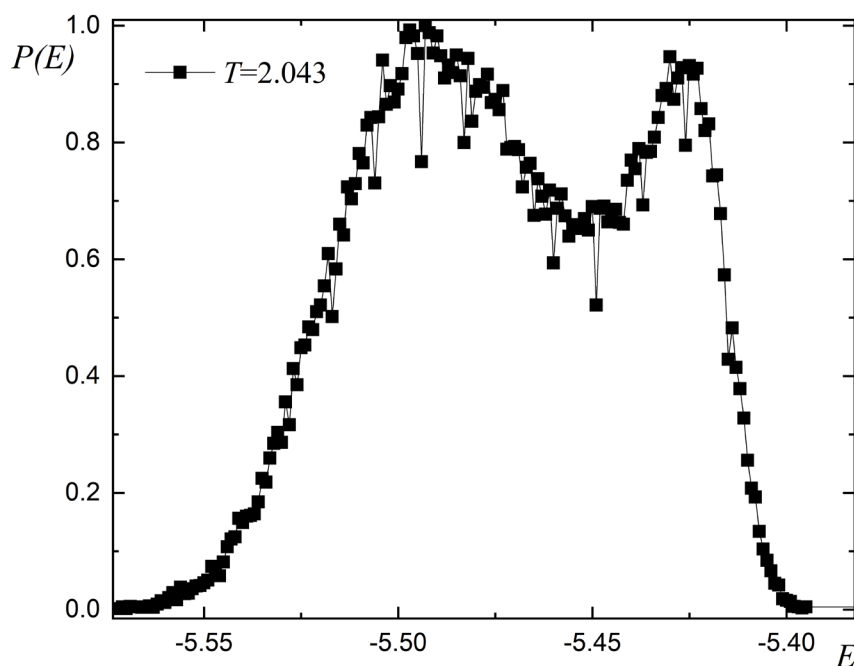


Рис. 3.10. Гистограмма распределения энергии для $h=12.0$.

Для дальнейшего анализа природы ФП в интервале МП $11.0 \leq h \leq 14.0$ нами был использован гистограммный метод анализа МК данных. Гистограммный метод анализа МК данных весьма эффективно можно использовать для анализа характера ФП [112]. На рисунке 3.9 приведены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L=24, 36$ и 60 при значении МП $h=11$. Графики построены для значения температуры близкой к критической температуре. Видно, что на гистограммах наблюдаются два максимума (бимодальность). Наличие двух максимумов на гистограмме свидетельствуют в пользу ФП 1 рода. Как видно на рисунке 3.9 при увеличении линейных размеров решетки L бимодальность становится еще более отчетливой. Это говорит, о том, что в системе наблюдается ФП первого рода. Такое же бимодальное распределение энергии наблюдается на гистограмме для значений МП $h=12$ для линейных размеров $L=24$ (рис 3.10) и $h=13$. Таким образом из полученных результатов можно предположить, что в данной области значений МП $11.0 \leq h \leq 13.0$ в системе происходит ФП 1 рода.

На рисунке 3.11 представлена фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля h . На диаграмме видно, что в точке $h=10$ пересекаются три различные фазы:

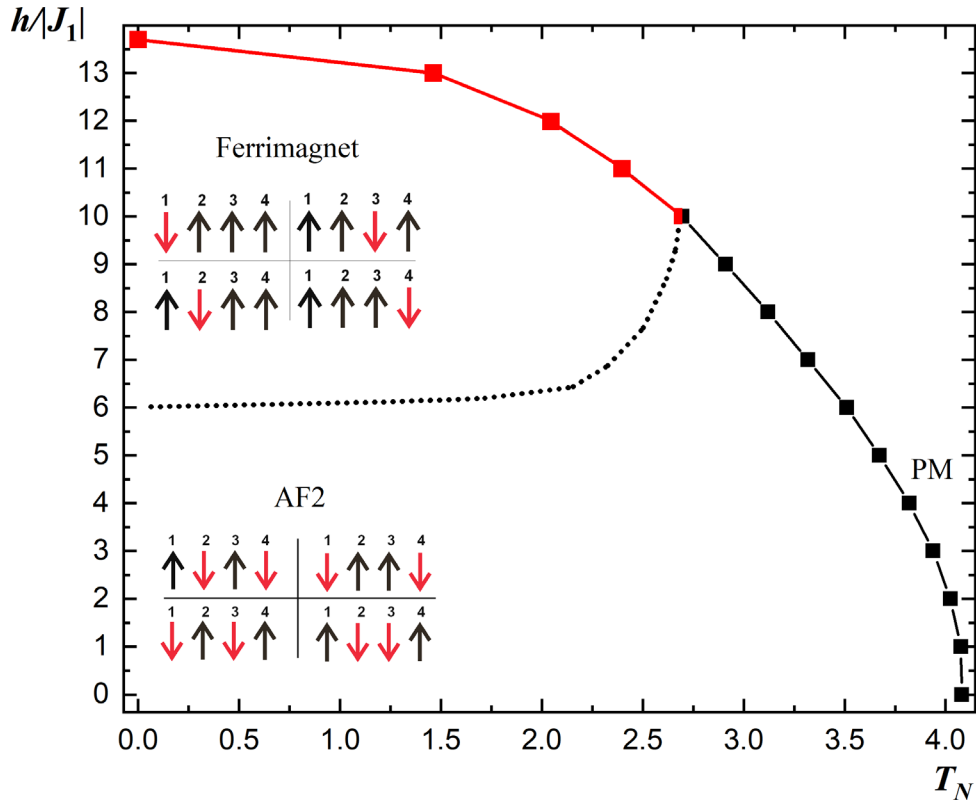


Рис. 3.11. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_1|$. Черными квадратами отмечены точки ФП второго рода ($0.0 \leq h \leq 10.0$). Красными квадратами отмечены точки ФП первого рода ($11.0 \leq h \leq 13.7$).

антиферромагнитная фаза 2-го типа-AF2, ферримагнитная и парамагнитная. Черными и красными стрелками обозначены направления спинов в каждой подрешетке. Красная линия соответствует ФП первого рода из ферримагнитной фазы в парамагнитную. Черная линия с квадратами соответствует ФП второго рода из антиферромагнитной фазы 2-го типа в парамагнитную [70, 199]. Пунктиром обозначена предполагаемая граница антиферромагнетик-ферримагнетик [201].

Появление различных фаз на диаграмме обусловлено изменением магнитной структуры основного состояния. Каждой фазе соответствуют различные магнитные структуры. Как видно на рисунке, в основном состоянии т.е. при температурах близким к нулю антиферромагнитное упорядочение AF2 сохраняется в диапазоне значений МП $0.0 \leq h < 6.0$. В диапазоне значений МП $7.0 \leq h < 13.7$ – наблюдается ферримагнитное упорядочение, где спины трех подрешеток противонаправлены спином одной подрешетки. Дальнейшее

увеличение МП $h \geq 13.8$ приводит систему в ферромагнитное упорядочение и подавлению ФП. При значении МП $h=6$, на границе антиферромагнитной и ферромагнитной фазы структура основного состояния частично разупорядочена.

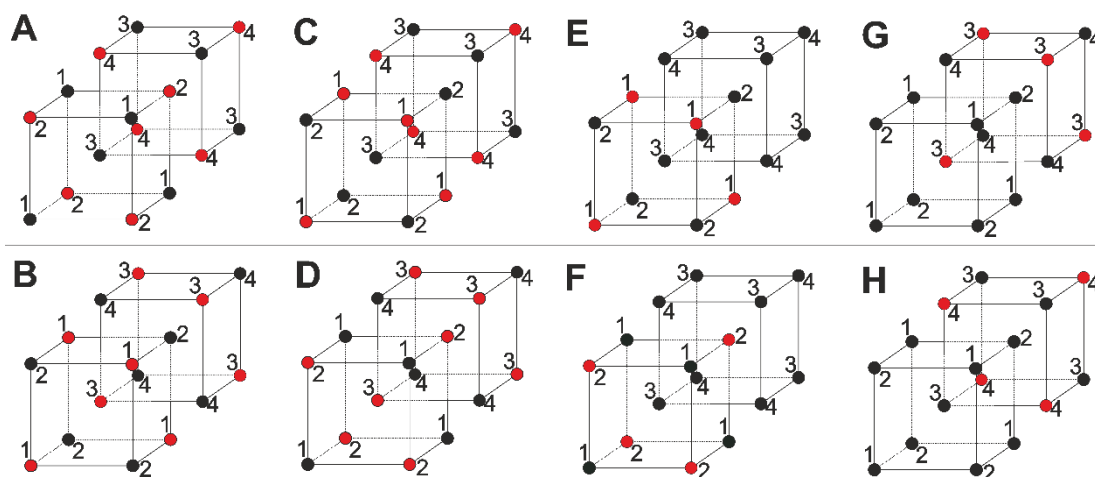


Рис. 3.12. Магнитные структуры основного состояния модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия магнитного поля при $k=1$.

На рисунке 3.12 приведено схематическое изображение магнитных структур основного состояния для исследуемой модели. Структуры получены путем визуализации системы в основном состоянии т.е. при минимальной исследуемой температуре ($T=0.1$). Эти структуры соответствуют указанным на фазовой диаграмме структурам. Цифрами на рисунке обозначены номера подрешеток. Красный или черный цвет в узлах решетки это условные направления спинов «вверх» или «вниз». На этом рисунке буквами от «А» до «Н» показаны все возможные магнитные структуры для разных значений магнитных полей.

Как видно на фазовой диаграмме (рис. 3.11), в фазе AF2 могут реализоваться четыре структуры основного состояния (рис. 3.12, А-Д). В фазе Ferromagnet реализуются четыре структуры основного состояния (рис. 3.12, Е-Н).

Таким образом из полученных результатов исследований можно сделать вывод, что в диапазоне значений МП $0.0 \leq h \leq 10.0$ происходит фазовый

переход второго рода, а в диапазоне $11.0 \leq h \leq 13.7$ фазовый переход первого рода.

3.2. Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в вырожденном состоянии.

В данном параграфе представлены результаты полученные на основе специального репличного алгоритма метода МК при исследовании влияния магнитного поля на термодинамические свойства и ФП антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих за ближайшими соседней.

Гамильтониан данной системы описывается формулой (3.1). В данном параграфе главы рассматривается случай, когда $J_1 = -1$, $J_2 = -2/3$. $k = J_2/J_1 = 2/3$

Для этой модели ($k=2/3$) без наличия МП было показано, что в системе происходит шестикратное вырождение системы и возможны шесть различных антиферромагнитных упорядочений в основном состоянии (рис 3.2). В рассматриваемой модели без учета МП происходит ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную [189].

Исследование модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых ближайших соседей, следующих ближайших соседей и магнитного поля методом МК на сегодняшний день не проводилось.

Для построения температурных зависимостей теплоемкости C использовалось выражение (3.2).

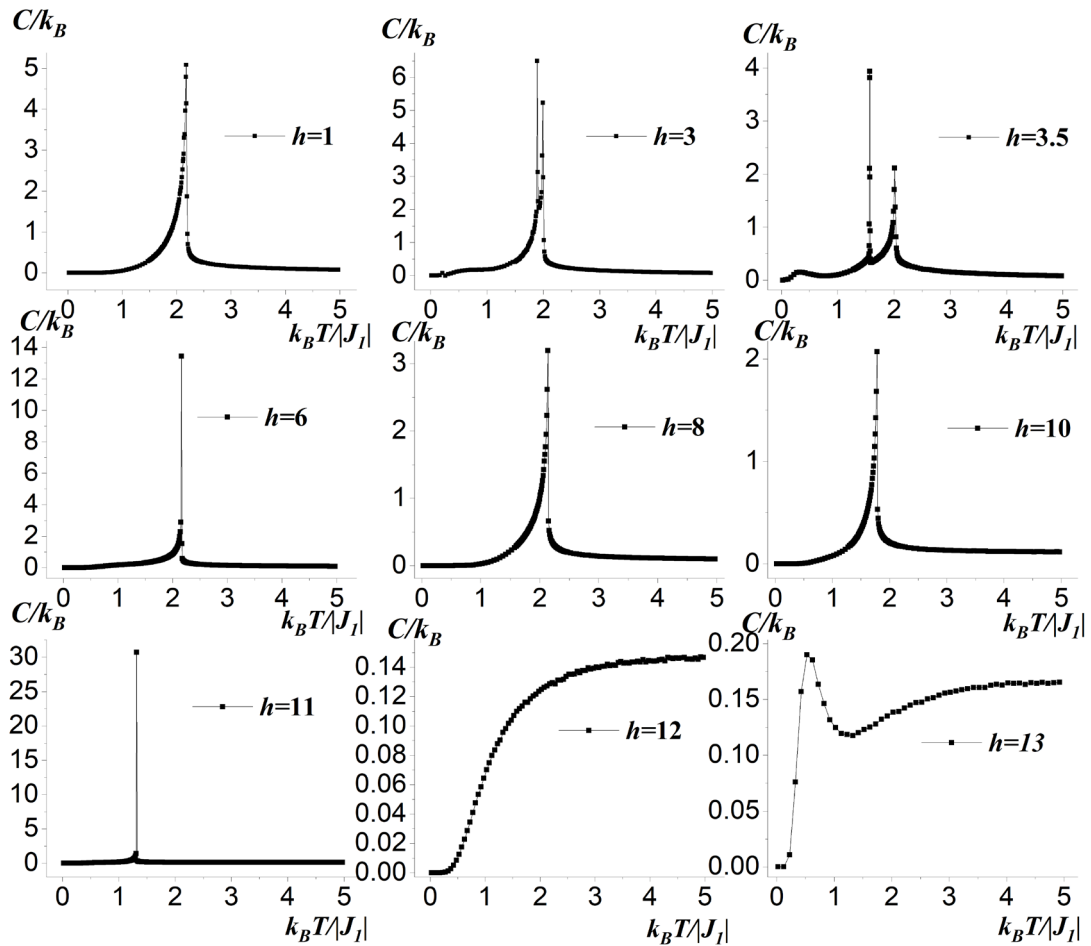


Рис. 3.13. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_I|$ для разных значений h

На рисунке 3.13 показаны температурные зависимости теплоемкости при $L=24$ для разных значений величины МП. На данном рисунке видно, что для полей $h=3.0$ и $h=3.5$ на графиках теплоемкости наблюдаются 2 максимума. Причем с увеличением значения МП первый максимум смещается в сторону низких температур. Наличие двух максимумов на теплоемкости связано с двумя фазовыми переходами. Первый максимум соответствует ФП 1 рода из антиферромагнитной фазы в ферромагнитную, второй максимум соответствует ФП 2 рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Для некоторых полей ($h \approx 3.5$) в низкотемпературной области ($k_B T/|J_I| \approx 0.35$) мы обнаружили слабо выраженные максимумы. Наличие слабых максимумов в низкотемпературной области связано с промежуточным частичным разупорядочением основного состояния. При значениях МП $4.0 \leq h \leq 11.0$ пропадает первый максимум и остается один максимум, соответствующий ФП

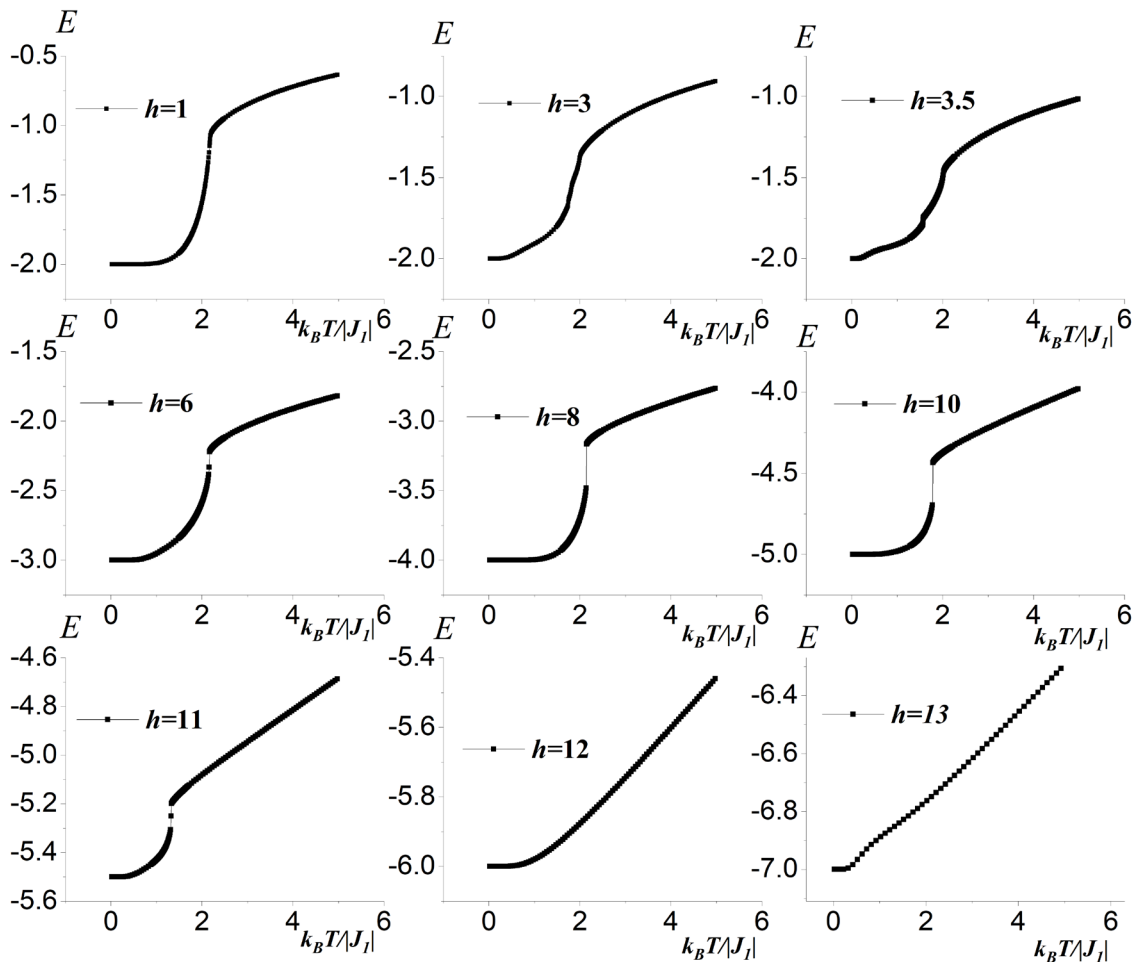


Рис 3.14. Зависимость энергии системы от температуры $k_B T / |J_l|$ для разных значений h .

1 рода. При дальнейшем увеличении значения МП $h \geq 12$ пропадает характерный скачок на графике теплоемкости и происходит подавление ФП. Незначительный скачок теплоемкости (рис $h=13$) связан с тем, что при данном значении магнитного поля система в основном состоянии имеет максимальную намагниченность $M=1$ и при увеличении температуры намагниченность плавно спадает. Можно предположить, что при значениях МП $h \geq 12$ ФП подавляется магнитным полем так как максимум теплоемкости слабо выражен, на фоне остальных значений МП.

На рисунке 3.14 приведены температурные зависимости энергии для разных значений МП. Для значения МП $h=1$ здесь видно непрерывная зависимость соответствующая ФП 2 рода. Для $h=3.0$ температуры ФП 1 рода и ФП 2 рода находятся близко и резкий скачок ФП 1 рода отчетливо не заметен на графике как в случае $h=3.5$. При значении МП $h=3.5$ видны 2 скачка

характерные для ФП 1 рода и ФП 2 рода. При значениях МП $6.0 \leq h \leq 11.0$. видны резкие скачки энергии характерные для ФП 1 рода. При дальнейшем увеличении значения МП $h \geq 12$ МП подавляет ФП и наблюдается плавный рост энергии без характерных скачков.

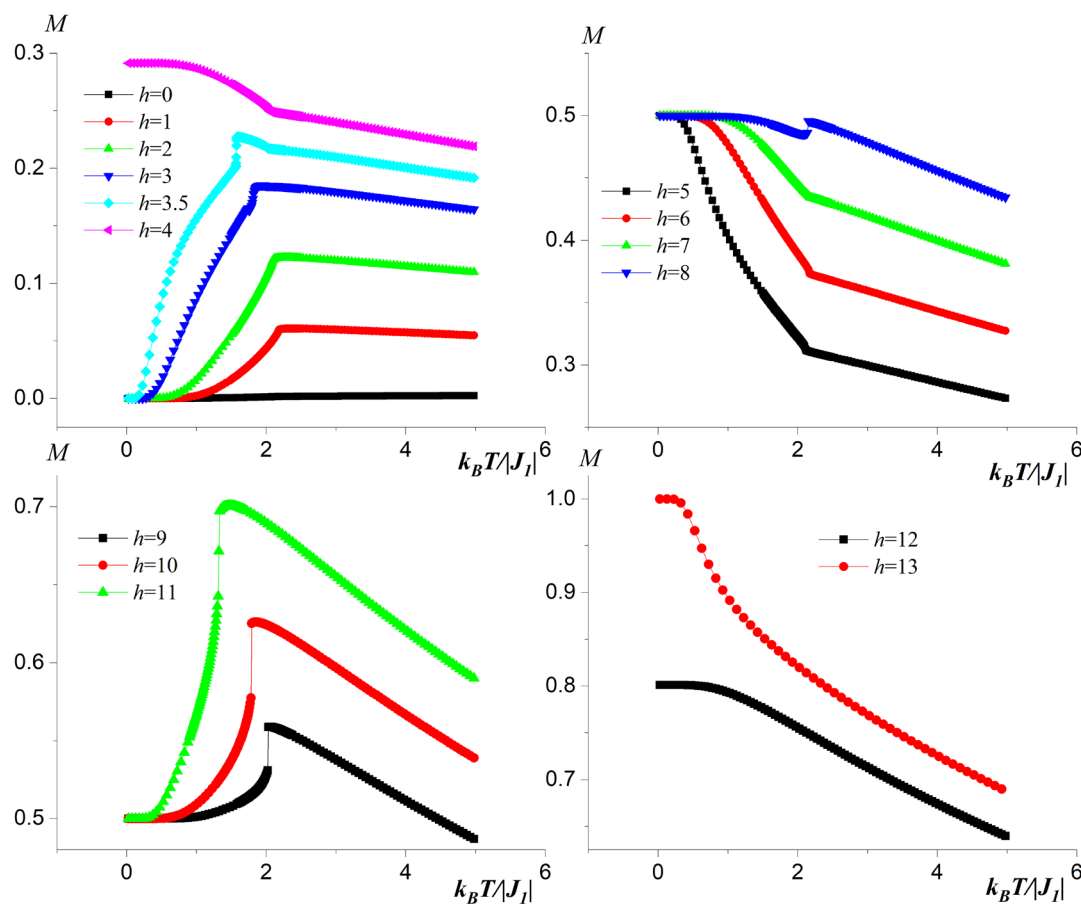


Рис. 3.15. Зависимости намагниченности M от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h

Температурные зависимости намагниченности для различных значений h приведены на рисунке 3.15. Для нулевого значения магнитного поля, как и ожидалось намагниченность равна нулю. Как говорилось ранее рассматриваемая система имеет магнитные подрешетки, связанные с симметрией решетки. На рисунке видно, что в низкотемпературной области намагниченность принимает значения $M=0$, $M=0.3$, $M=0.5$, $M=0.8$, $M=1$ соответствующие различным структурам основного состояния: антиферромагнитная ($M=0$), частично разупорядоченная антиферромагнитная ($M=0.3$), ферромагнитная ($M=0.5$), частично разупорядоченная ферромагнитная ($M=0.8$) и ферромагнитная ($M=1$). Для значений МП

$1.0 \leq h \leq 3.5$ с ростом температуры намагниченность растет. Это можно объяснить тем, что в низкотемпературной области система имеет антиферромагнитное упорядочение и температурные флуктуации нарушают антиферромагнитное упорядочение в пользу ферромагнитного и намагниченность растет до температуры ФП, после чего падает с ростом температуры. Для значений МП $h=3$ и $h=3.5$ с ростом температуры намагниченность растет до температуры ФП 1 рода. При температуре ФП 1 рода видно, что намагниченность меняется скачкообразно. Дальнейшее увеличение температуры ведет к плавному спаду намагниченности. Такое поведение зависимости намагниченности можно объяснить тем, что в системе происходит ФП 1 рода из антиферромагнитной фазы в ферромагнитную после чего происходит ФП 2 рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Для значений МП $5.0 \leq h \leq 8.0$ с ростом температуры намагниченность падает. В низкотемпературной области система упорядочена ферромагнитно и при данных значениях МП, температурные флуктуации нарушают ферромагнитное упорядочение в пользу антиферромагнитного состояния. А при бóльших значениях МП $9.0 \leq h \leq 11.0$ происходит рост намагниченности с ростом температуры. Это связано с тем, что температурные флуктуации до точки ФП нарушают ферромагнитное упорядочение в пользу ферромагнитного упорядочения. Для полей $h \geq 12$ намагниченность с ростом температуры плавно спадает. Система из ферромагнитной фазы плавно переходит в парамагнитную фазу.

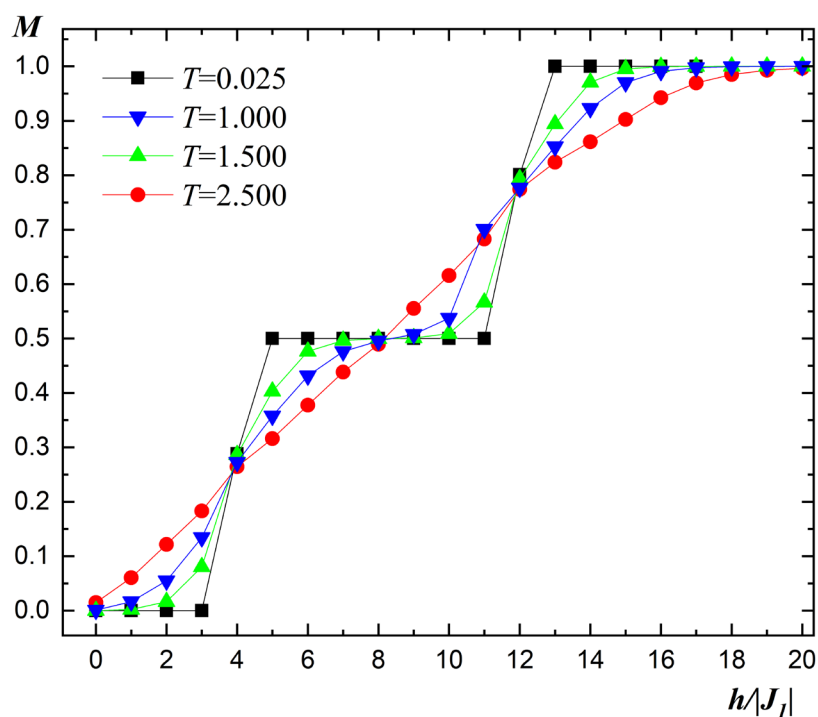


Рис. 3.16. Зависимость намагниченности M от магнитного поля $h/|J_I|$ для разных значений температур.

На рисунке 3.16 представлена зависимость намагниченности от магнитного поля для разных значений температур. Для основного состояния

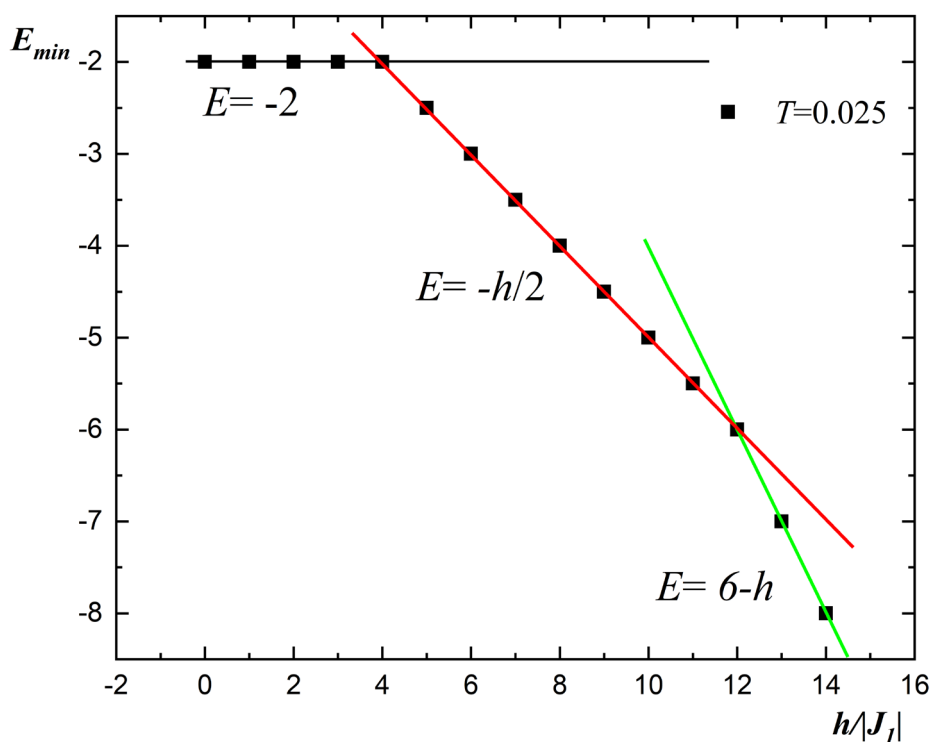


Рис. 3.17. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля $h/|J_I|$.

при температуре $T=0.025$ на рисунке наблюдаются три плато намагниченности, которые приходятся на 0, 1/2 и 1 намагниченности насыщения. В диапазоне значения магнитного поля $0.0 \leq h < 4.0$ спины двух подрешеток направлены по внешнему полю, а две оставшиеся подрешетки ориентированы противоположно, против внешнего МП. Такое антиферромагнитное упорядочение и приводит к нулевой намагниченности всей системы. При $h > 4.0$ еще одна подрешетка поворачивается вдоль поля. Все спины трех подрешеток направлены по внешнему полю, а спины одной подрешетки - против поля. Система переходит в ферромагнитное состояние. Это объясняет появление плато намагниченности равное 1/2 намагниченности насыщения. При еще бóльших значениях МП $h > 12.0$ все четыре подрешетки ориентируются вдоль поля, что приводит к насыщению намагниченности. С ростом температуры плато исчезают и наблюдается плавный рост намагниченности. Это объясняется тепловыми флуктуациями спинов. Для основного состояния при $T=0.025$ на рисунке 3.16 видны промежуточные значения намагниченности $M \approx 0.25$ и $M \approx 0.8$ приходящие на значения МП $h=4$ и $h=12$ соответственно. При этих значениях МП основное состояние системы частично разупорядочено. Для всех значений магнитных полей кроме $h=4$ и $h=12$ намагниченности отдельных подрешеток равны $|M| = 1/4$ от общей намагниченности системы.

На рисунке 3.17 представлена зависимость минимальной энергии E_{min} системы от величины магнитного поля. На рисунке мы наблюдаем три разные области зависимости энергии от магнитного поля. В первой области ($0.0 \leq h \leq 4.0$), где наблюдается антиферромагнитное упорядочение, энергия системы не зависит от величины поля. Во второй области ($4.0 \leq h \leq 12.0$) наблюдается медленный спад энергии с увеличением магнитного поля. В этой области система упорядочена ферромагнитно. В третьей области

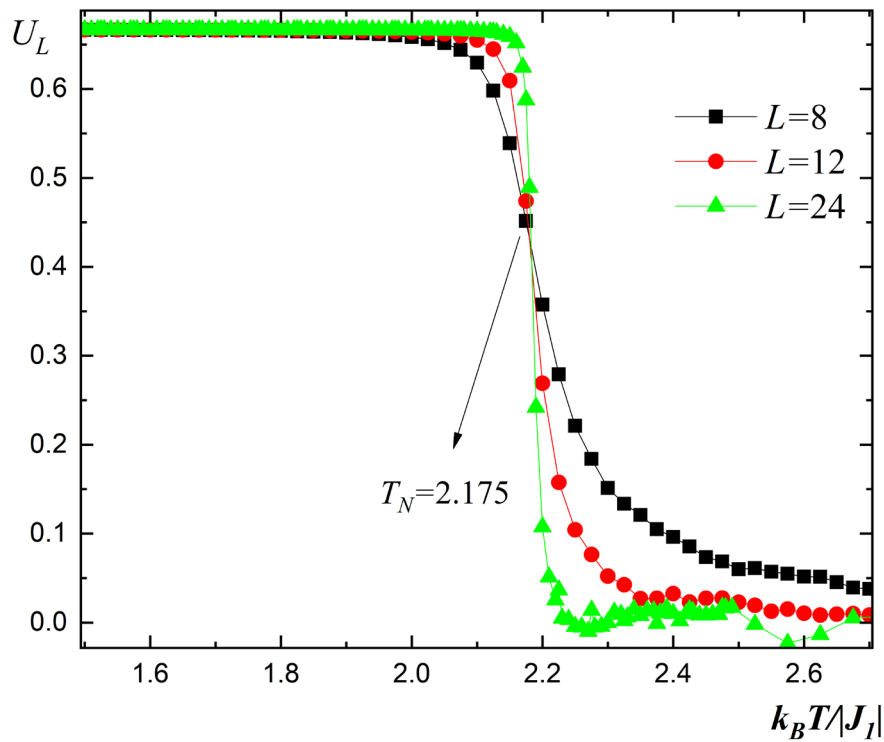


Рис. 3.18. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=1.0$.

($12.0 \leq h \leq 14.0$), где наблюдается полное ферромагнитное упорядочение системы мы наблюдаем более резкий спад энергии от значения МП.

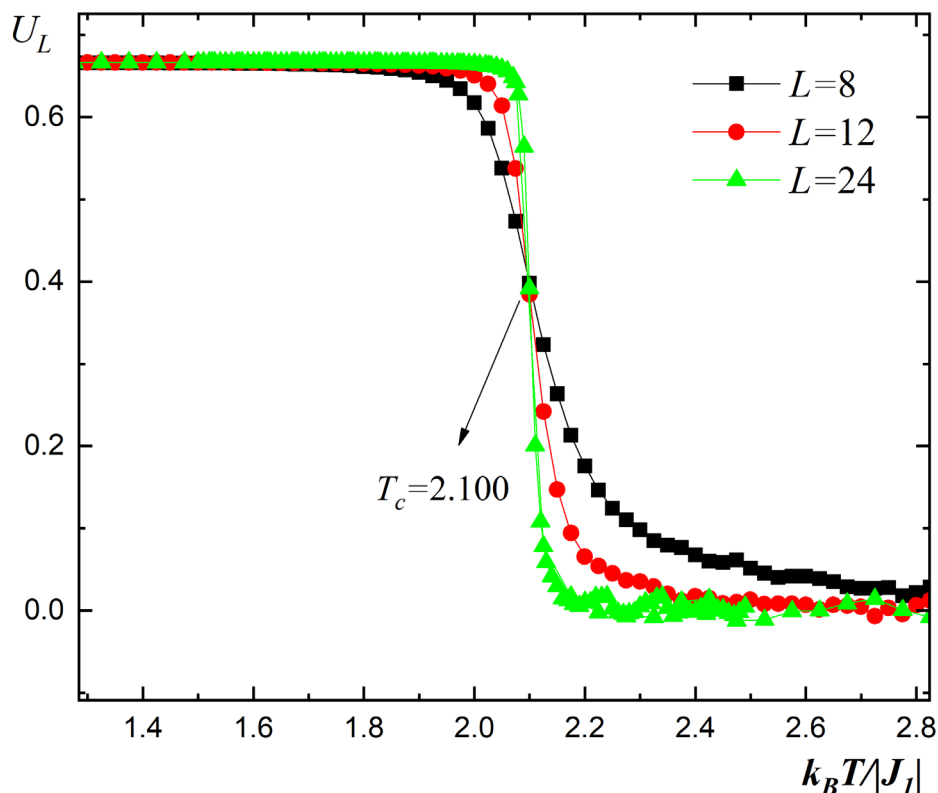


Рис. 3.19. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных L при $h=2.0$.

На рис. 3.18 и 3.19. представлены зависимости кумулянтов Биндера четвертого порядка U_L для разных размеров системы L при значении магнитного поля $h=1.0$ и $h=2.0$. соответственно. Отметим, что использование кумулянтов Биндера четвертого порядка дают возможность хорошо протестировать род магнитного ФП. В случае реализации в системе ФП второго рода кривые температурной зависимости для разных линейных размеров имеют четко выраженную точку пересечения [197]. На рисунке 3.18 видна отчетливая точка пересечения кривых ($T_N=2.175$), которая свидетельствует о том, что в системе реализуется ФП второго рода. Точка пересечения также указывает на критическую температуру. Аналогичные зависимости кумулянтов Биндера были построены для всех значений МП, где происходит ФП 2 рода. Анализ показывает, что обнаружилось, что в интервале $0.0 \leq h \leq 2.7$ наблюдается ФП второго рода. При других значениях МП на

зависимостях кумулянтов Биндера не наблюдаются точки пересечения. Это затрудняет определение рода ФП.

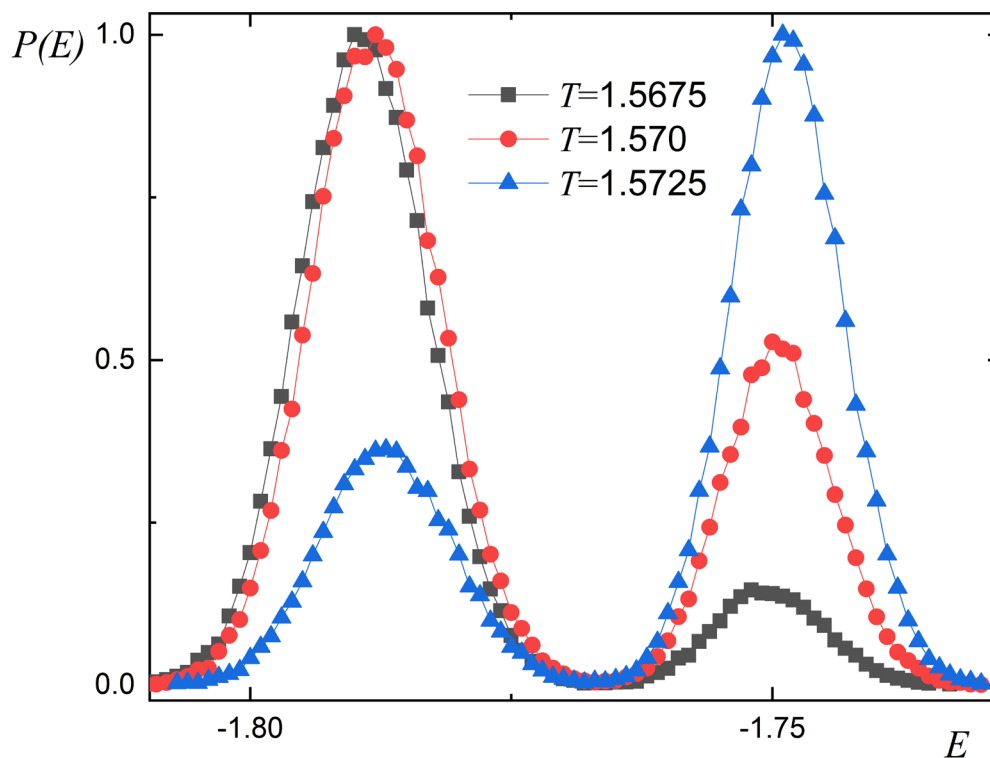


Рис. 3.20. Гистограмма распределения энергии для $h=3.5$.

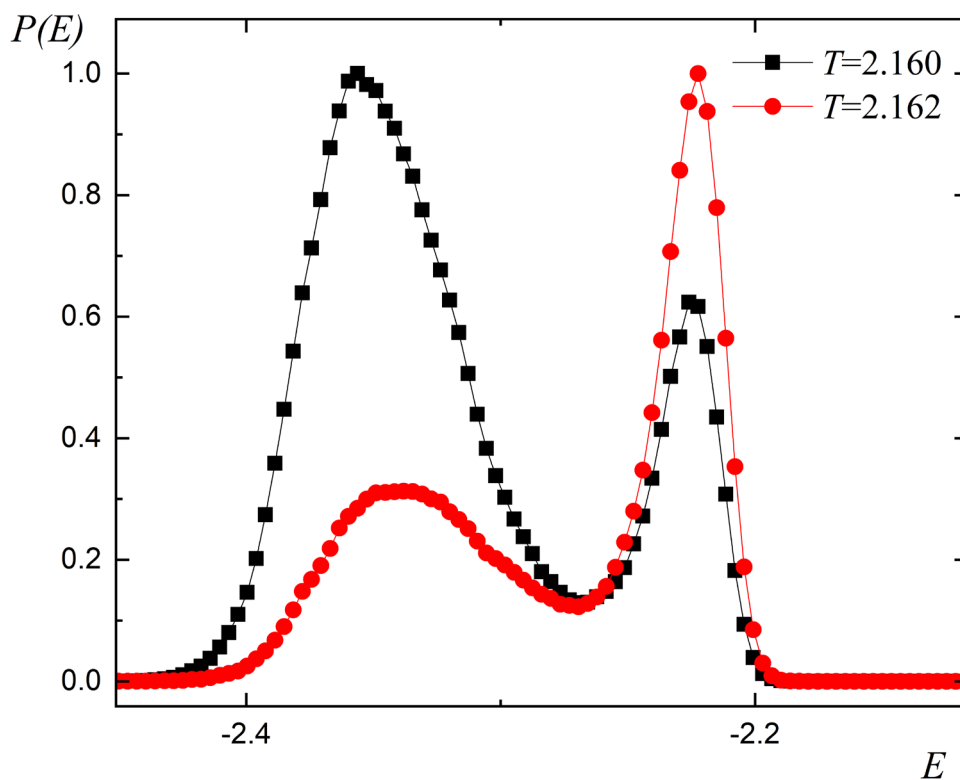


Рис. 3.21. Гистограмма распределения энергии для $h=6.0$.

Для дальнейшего анализа природы ФП нами был использован гистограммный метод анализа данных, согласно которой в случае ФП 1 рода на гистограмме распределения энергии вблизи температуры T_C наблюдаются два максимума [112]. На рисунках 3.20 и 3.21 приведены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L=24$ для значения МП $h=3.5$ ($T=1.570$) и $h=6$ соответственно. Графики построены для температур близких к критической температуре. Видно, что на гистограммах наблюдаются два максимума (бимодальность), которые свидетельствуют в пользу ФП первого рода. Такое же поведение гистограмм наблюдается в диапазоне значения МП $2.8 \leq h < 4.0$. и $5.0 \leq h < 12.0$.

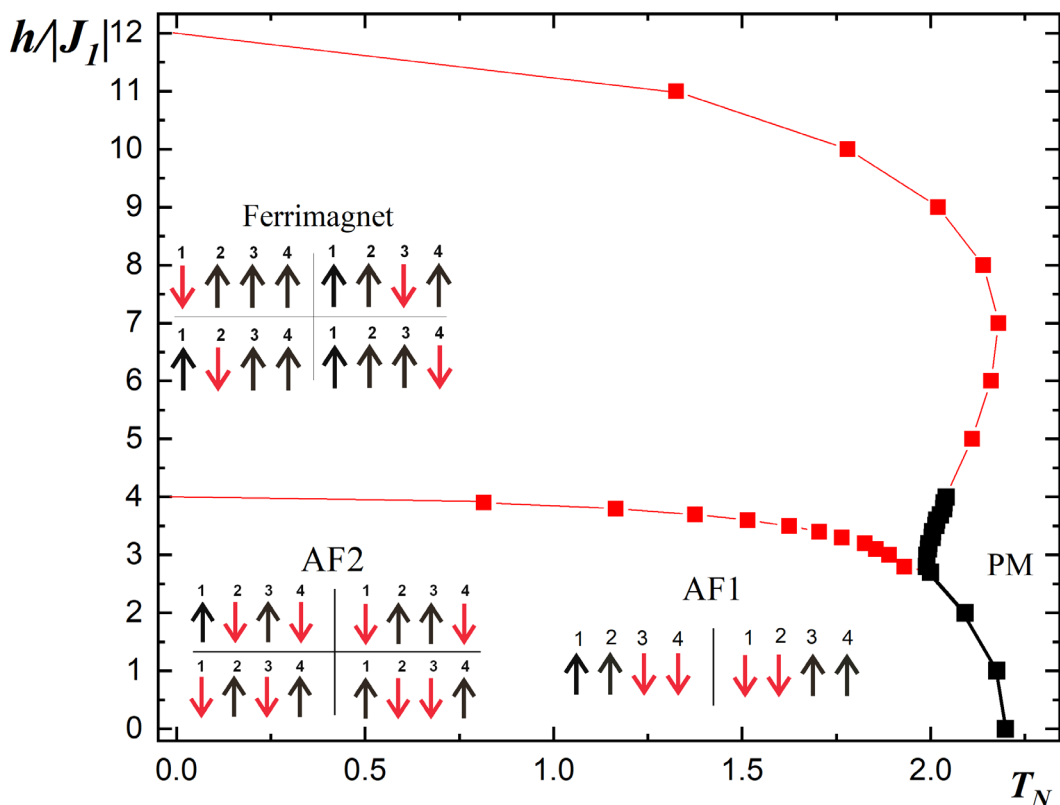


Рис. 3.22. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_1|$. Черными квадратами отмечены точки ФП второго рода, красными квадратами отмечены точки ФП первого рода.

На рисунке 3.22 представлена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины МП. На диаграмме видно, что вблизи точки $h=2.7$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная, ферримагнитная и парамагнитная. Причем в антиферромагнитной области могут реализоваться два разных типа упорядочения AF1-антиферромагнитная

1-го типа и AF2 - антиферромагнитная 2-го типа. Полученные структуры согласуются с результатами, которые получены в работах [70, 189, 199]. На фазовой диаграмме черными и красными стрелками изображены направления спинов во всех подрешетках.

В антиферромагнитной фазе спины двух подрешеток направлены противоположно спинам двух других подрешеток. При ферромагнитной фазе спины трех подрешеток противонаправлены спинам одной подрешетки (рис. 3.12, Е-Н).

В диапазоне значений МП $0.0 \leq h < 2.7$. реализуется ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную. В интервале значений МП $2.8 \leq h \leq 4.0$. с увеличением температуры в системе происходят два ФП. В начале наблюдается ФП 1 рода из антиферромагнитной фазы в ферромагнитную, затем ФП 2 рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. В интервале значений МП $5.0 \leq h \leq 11.0$. в системе наблюдается ФП 1 рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Дальнейшее увеличение МП $h \geq 12$ приводит к подавлению ФП.

3.3. Влияние магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические свойства модели Изинга в антиферромагнитной фазе 1-го типа.

В данном параграфе представлены результаты влияния магнитного поля на термодинамические свойства и ФП антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих ближайших соседей.

Гамильтониан этой системы описывается формулой (3.1). В данном параграфе главы рассматривается случай, когда $J_1 = -1$, $J_2 = -0.5$, $k = J_2/J_1 = 0.5$.

Отметим, что для рассматриваемой антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке при $k = 0.5$ без наличия внешнего МП происходит ФП 2 рода.

На фазовой диаграмме (рис. 3.2) показано, что при $k=0.5$ система упорядочена как AF1-антиферромагнетик 1-го типа [189].

Для построения графиков зависимости теплоемкости от температуры использовалось выражение (3.2). Для построения температурных зависимостей восприимчивости χ использовалось выражение [190]:

$$\chi = \begin{cases} (NK) \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right), & T < T_N \\ (NK) \langle M^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases} \quad (3.5)$$

где N – число частиц, $K = |J_1| / k_B T$, M – намагниченность. Намагниченность вычислялась по формуле (3.3).

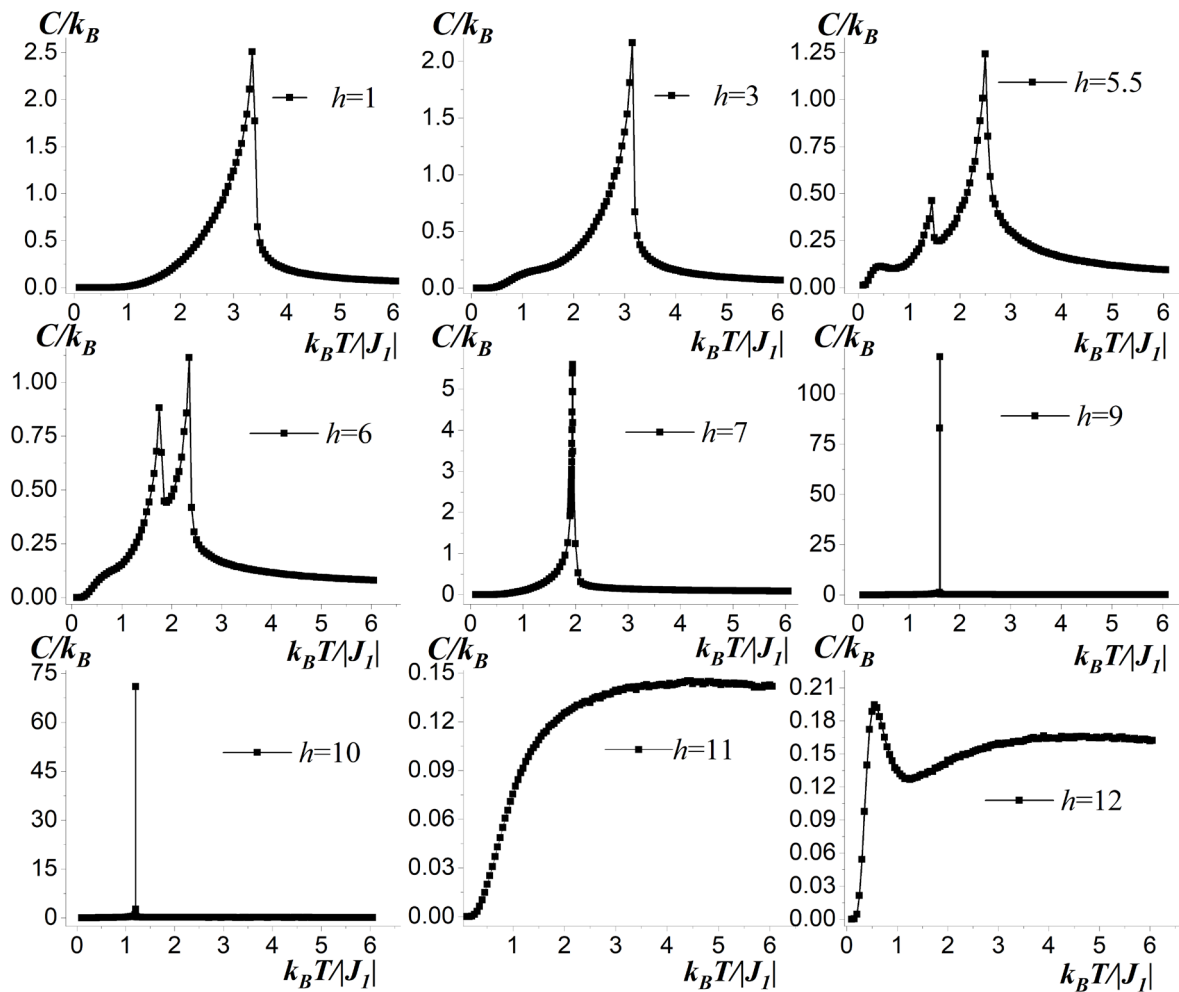


Рис. 3.23. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных значений h .

На рисунке 3.23 и 3.24 показаны температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости соответственно при $L=24$ для разных значений величины МП. На рисунках видно, что в интервале магнитного поля $0.0 \leq h \leq 10.0$ с увеличением значения h наблюдается сдвиг максимумов теплоемкости и восприимчивости в сторону низких температур. Сдвиг максимумов теплоемкости в сторону более низких температур обусловлен конкуренцией обменных взаимодействий и внешнего магнитного поля. Обменные взаимодействия пытаются выстроить антиферромагнитное упорядочение, а внешнее магнитное поле выстраивает упорядочение по направлению поля. В результате этого в системе происходит сдвиг максимума теплоемкости в сторону более низких температур. На зависимостях теплоемкости можно заметить, что для значений МП $7.0 \leq h \leq 10.0$ в критической области наблюдаются более резкие максимумы. Такие резкие максимумы обычно характерны для ФП первого рода. Можно предположить, что для этих значений полей в системе происходит ФП первого рода. Для значения магнитного поля $h=5.5$ и $h=6$ на зависимостях теплоемкости и восприимчивости наблюдаются по два максимума. Скорее всего это связано с тем, что здесь реализуется два ФП. Первый максимум соответствует ФП из антиферромагнитной фазы в ферримагнитную, а второй максимум соответствует ФП из ферримагнитной в парамагнитную. Наличие небольших максимумов в низкотемпературных областях связано с промежуточным частным разупорядочением основного состояния. При значениях поля $h \geq 11$ максимум теплоемкости исчезает. Можно предположить, что при значениях МП $h \geq 11$ внешнее магнитное поле подавляет ФП. На рисунке 3.24 восприимчивость для МП $h=5$ и $h=11$ в нулевой температуре имеет максимальное значение и с ростом температуры падает. Это является

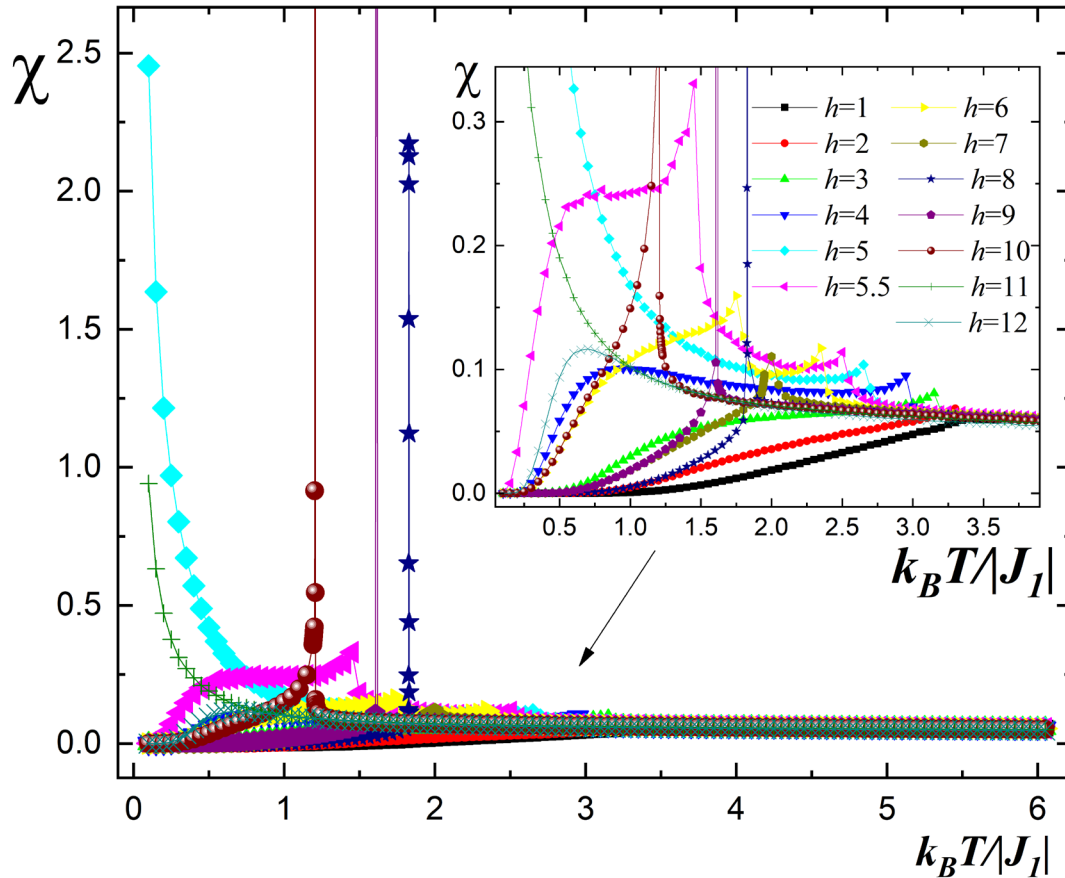


Рис. 3.24. Зависимость магнитной восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных значений h .

следствием того, что эти значения полей соответствуют граничным значениям между антиферромагнитным - ферримагнитным для $h=5$ и ферримагнитным – ферромагнитным состоянием для $h=11$. Для этих значений полей система в основном состоянии вырождена и частично разупорядочена. Причем для поля $h=5$ с ростом температуры система восстанавливает антиферромагнитное упорядочение и при $T=2.650$ происходит ФП в парамагнитное состояние, а для $h=11$ МП подавляет ФП и наблюдается плавный спад без скачка восприимчивости. Также на рисунке (3.24) можно заметить, что для МП $h=8$, $h=9$ и $h=10$ скачок восприимчивости является более резким, что характерно для ФП 1 рода.

На рисунке 3.25 приведены температурные зависимости энергии для разных значений МП. Для значения МП $1.0 \leq h \leq 5.0$ видно плавный рост энергии системы соответствующий ФП 2 рода. Для $h=6.0$ можно заметить два изгиба на зависимости энергии от температуры, соответствующие двум ФП.

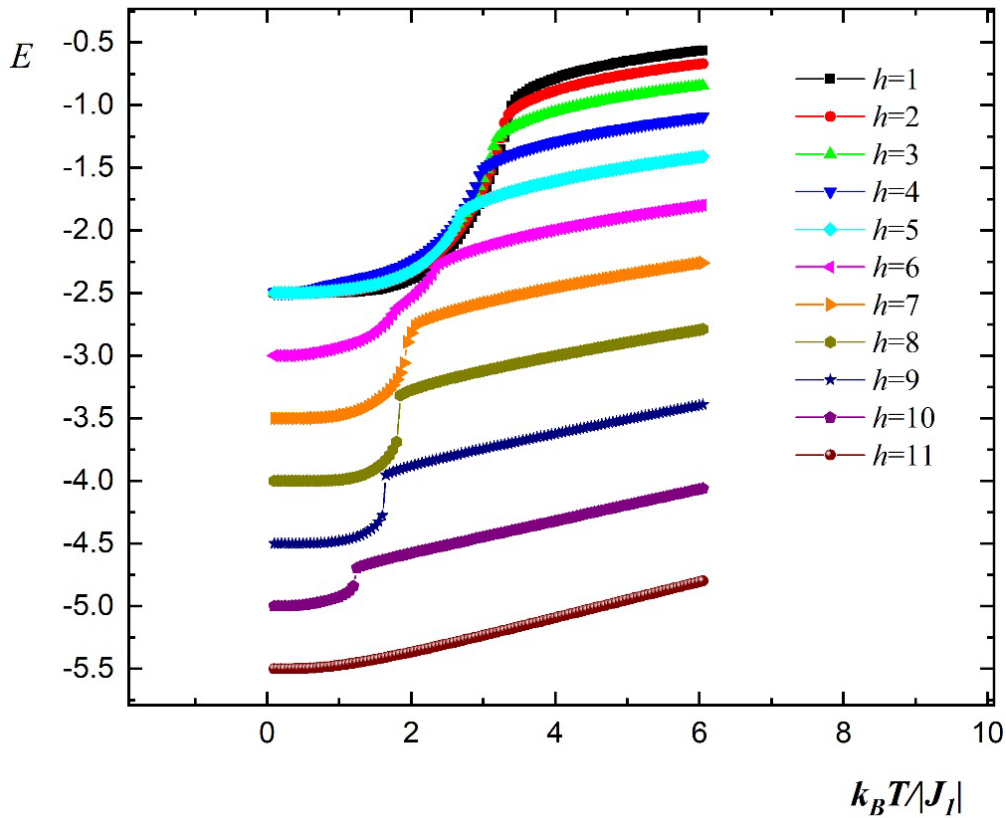


Рис. 3.25 Зависимость энергии системы от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных значений h .

При значениях МП $7.0 \leq h \leq 10.0$. наблюдаются резкие скачки энергии характерные для ФП 1 рода. При дальнейшем увеличении значения МП $h \geq 11$ подавляется ФП и наблюдается плавный рост энергии без характерного скачка. Можно предположить, что при увеличении значения МП в системе меняется ФП 2 рода на ФП 1 рода и в конце концов приводит к подавлению ФП.

Температурные зависимости намагниченности для различных значений h приведены на рисунке 3.26. При наличии внешнего магнитного поля намагниченность в области нулевых температур имеет ненулевые значения. В низкотемпературных областях намагниченность принимает определенные значения, соответствующие разным магнитным упорядочениям. Как мы уже упоминали рассматриваемая система имеет 4 магнитные подрешетки, связанные с симметрией решетки. Для значений МП $5.5 \leq h \leq 10.0$, где система в основном состоянии находится в ферромагнитной фазе видно, что с ростом

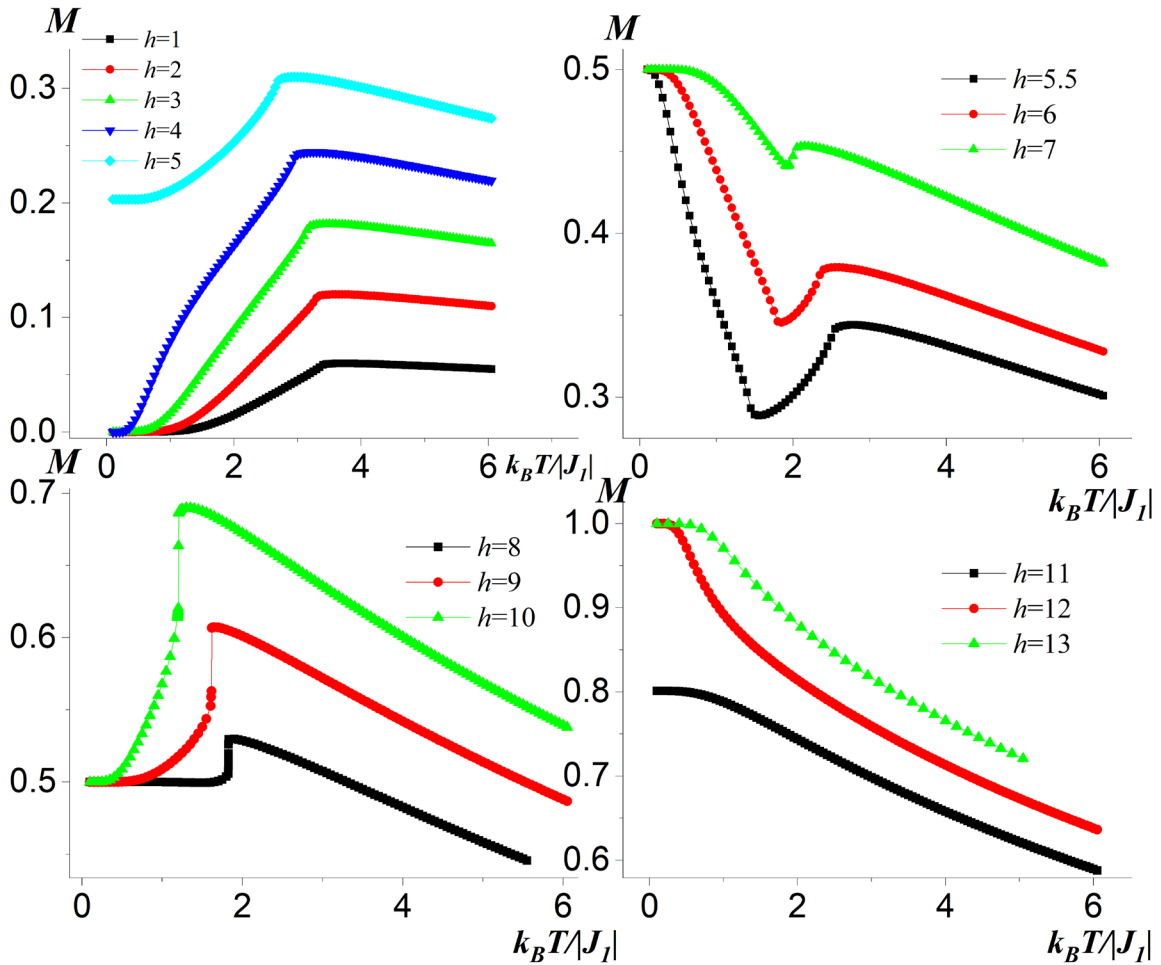


Рис. 3.26. Зависимости намагниченности M от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h .

температуры намагниченность может, как и расти (рис 3.26 $h=8, 9, 10$) так и спадать (рис 3.26 $h=5.5, 6, 7$). Здесь особое внимание стоит обратить на зависимости намагниченности при МП $h=5.5$ $h=6$ и $h=7$, где намагниченность с ростом температуры сначала падает потом растет и снова падает. Для этих значений полей с повышением температуры система из ферромагнитного состояния переходит в антиферромагнитное с уменьшением намагниченности. Далее из антиферромагнитной фазы система переходит в парамагнитную с увеличением намагниченности. Дальнейшее повышение температуры ведет к плавному спаду намагниченности. При магнитных полях $h=8, 9$ и 10 на графиках можно заметить резкие скачки намагниченности характерные для ФП 1 рода (рис 3. 26). При магнитном поле $h=11$ основное состояние системы частично разупорядочена. Система все еще не достигла

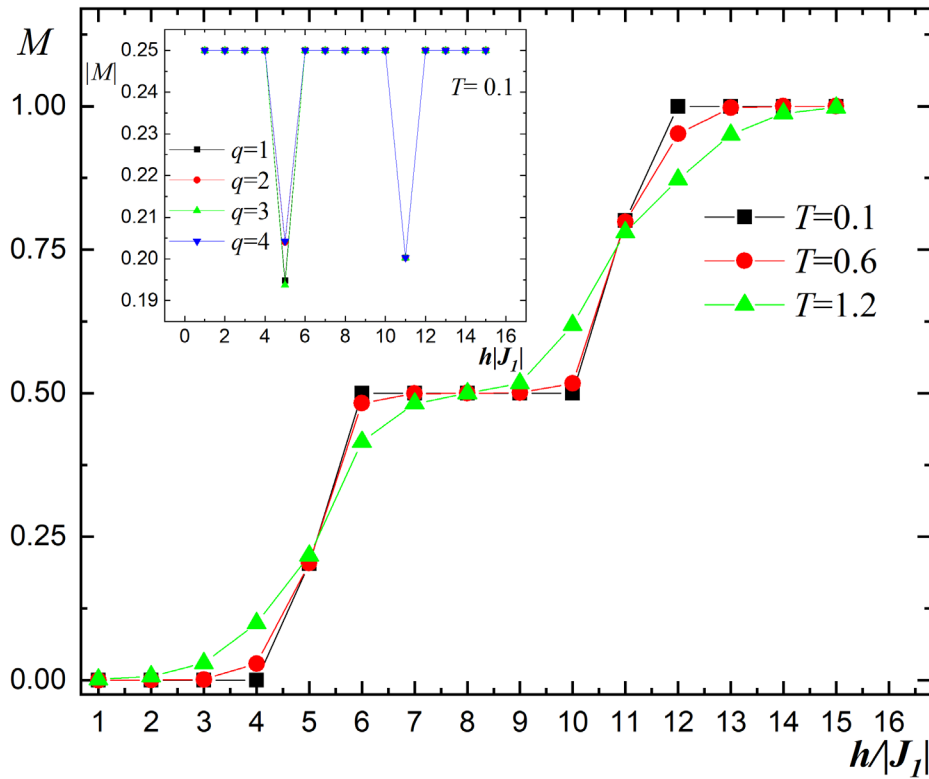


Рис. 3.27. Зависимость намагниченности M от магнитного поля $h/|J_1|$ для разных значений температур.

ферромагнитного состояния, но уже нарушена ферримагнитное упорядочение. Поэтому в низкотемпературной области намагниченность принимает значение $M=0.8$. При полях $h>11$ система уже упорядочена ферромагнитно и намагниченность с ростом температуры плавно спадает.

На рисунке 3.27 представлена зависимость намагниченности от магнитного поля для разных значений температур. На рисунке 3.27 на вкладке приведены намагниченности всех 4-х подрешеток отдельно. Для основного состояния при температуре $T=0.1$ на рисунке наблюдаются три плато намагниченности, которые приходятся на 0, 1/2 и 1 намагниченности насыщения. Для $T=0.1$ до достижения значения магнитного поля $h=5$ в системе сохраняется антиферромагнитное упорядочение и намагниченности равны нулю. В этой области МП $0.0 \leq h < 5.0$. спины двух подрешеток противоположны двум остальным подрешеткам. При $h>5.0$ еще одна подрешетка поворачивается вдоль поля. Все спины трех подрешеток

направлены по направлению поля в одном направлении, а спины одной подрешетки против. Система упорядочена ферромагнитно. Это объясняет появление плато намагниченности, равного $1/2$ намагниченности насыщения. При еще бóльших значениях МП $h > 11.0$ все четыре подрешетки ориентируются вдоль одного направления по полю, что приводит к насыщению намагниченности и появлению плато $M=1$. С ростом температуры плато исчезают и наблюдается плавный рост намагниченности. Это объясняется тепловыми флуктуациями спинов. Для основного состояния при

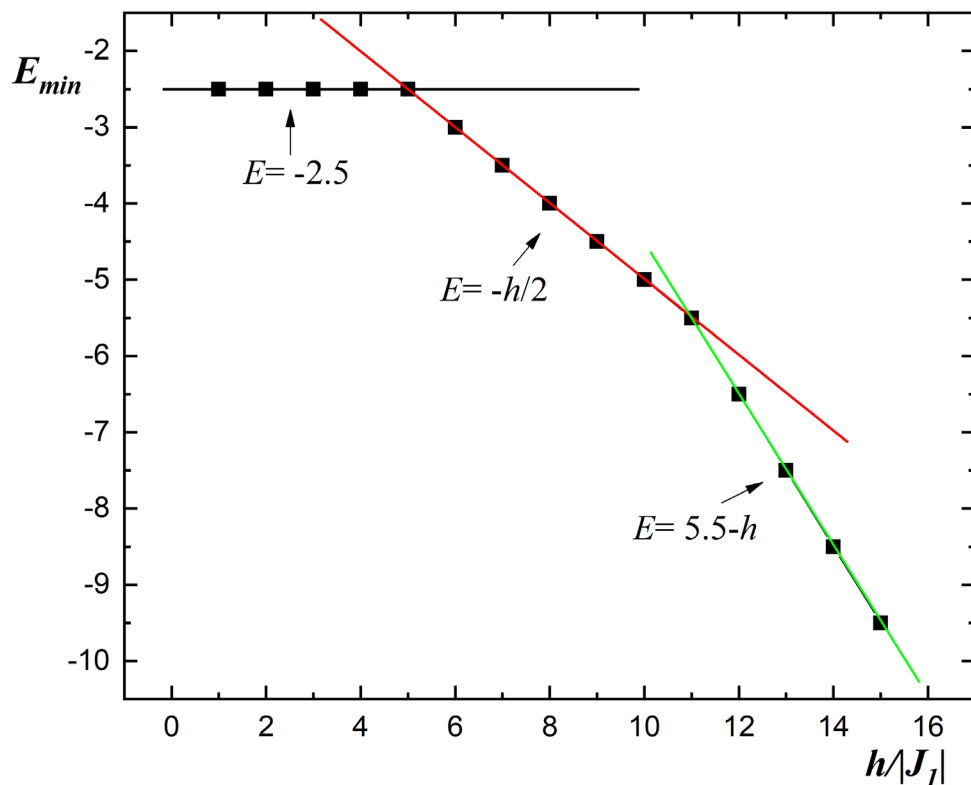


Рис. 3.28. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля $h/|J_1|$.

$T=0.1$ на рисунке 3.27 видны промежуточные значения намагниченности $M \approx 0.25$ и $M \approx 0.75$ приходящие на значения МП $h=5$ и $h=11$ соответственно. Как видно на вкладке в рисунке 3.27 намагниченности всех 4-х подрешеток - $q=1, 2, 3, 4$ равны $1/4$ намагниченности всей системы для всех значений полей за исключением $h=5$ и $h=11$. Это говорит о том, что при значениях МП $h=5$ и $h=11$ система частично разупорядочена.

Значения МП, соответствующие различным упорядочениям системы, можно увидеть и на зависимости минимальной энергии E_{min} системы от величины МП. На рисунке 3.28 представлена зависимость минимальной энергии E_{min} системы от величины магнитного поля. На рисунке мы наблюдаем три разные области зависимости энергии от магнитного поля. В первой области ($0.0 \leq h \leq 5.0$), где наблюдается антиферромагнитное упорядочение, энергия системы не зависит от величины поля. Во второй

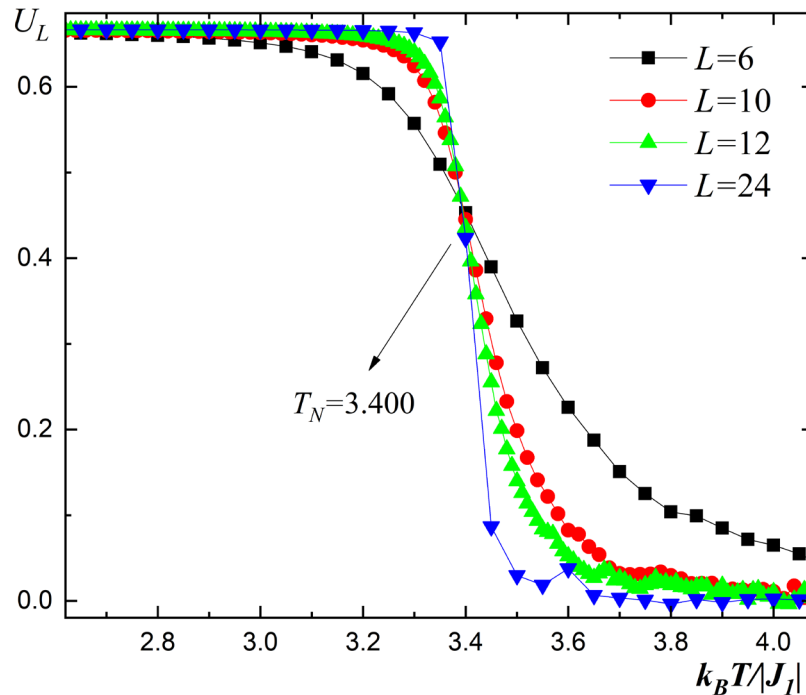


Рис. 3.29. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для разных L при $h=1.0$.

области ($5.0 \leq h \leq 11.0$) наблюдается медленный спад энергии с увеличением магнитного поля. В этой области система упорядочена ферромагнитно. В третьей области ($11.0 \leq h \leq 15.0$), где наблюдается полное ферромагнитное упорядочение системы мы наблюдаем более резкий спад энергии от поля.

Как описывалось ранее применение кумулянтов Биндера дает возможность хорошо тестировать тип ФП в системе. Для определения критических температур T_N , нами использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [197, 198]. Напомним, что в случае ФП 2 рода кумулянты Биндера по намагниченности U_L имеют четко выраженную точку

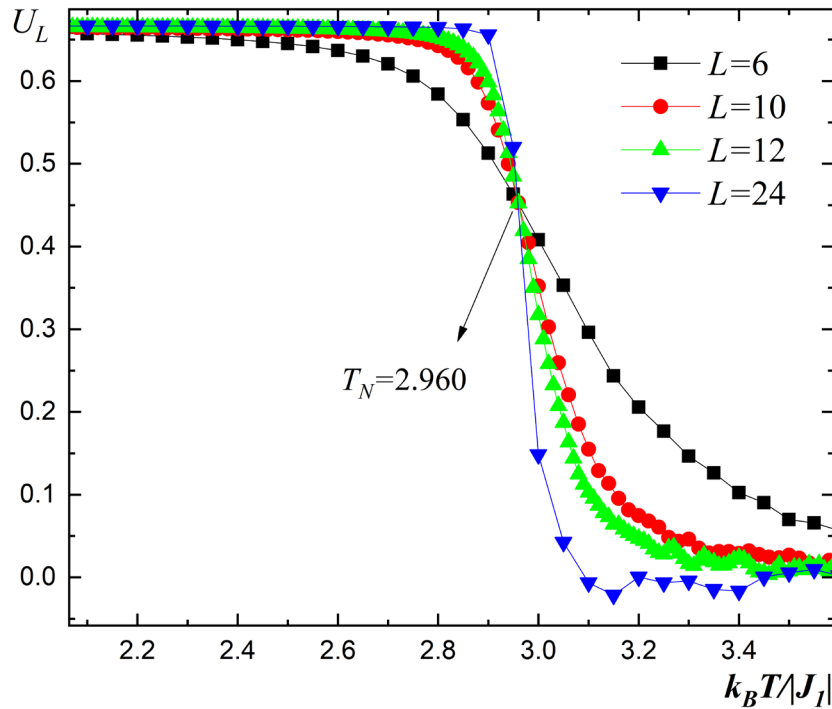


Рис. 3.30. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=4.0$.

пересечения для разных линейных размеров. Также точка пересечения кривых указывает на критическую температуру т.е. на температуру ФП.

На рис. 3.29 и 3.30. представлены зависимости кумулянта Биндера четвертого порядка по намагниченности U_L для разных размеров системы L при значении магнитного поля $h=1.0$ и $h=4.0$ соответственно. На рисунках видна отчетливая точка пересечения кривых, которая свидетельствует, что в системе реализуется ФП второго рода, а сама точка пересечения указывает на критическую температуру. Аналогично такие зависимости кумулянтов Биндера были построены для всех значений МП в интервале $0.0 \leq h \leq 7.0$. Анализ наших результатов показывает, что в интервале $0.0 \leq h \leq 7.0$ наблюдается ФП второго рода. В интервале $5.0 \leq h \leq 7.0$ в системе реализуется два ФП 2 рода. Для значений магнитных полей $h \geq 8.0$ на зависимостях кумулянтов Биндера не удалось обнаружить точки пересечения.

Для последующего анализа ФП был использован гистограммный метод анализа данных. С помощью гистограммного метода анализа МК данных можно с большой вероятностью обнаружить ФП 1 рода. Напомним, что в

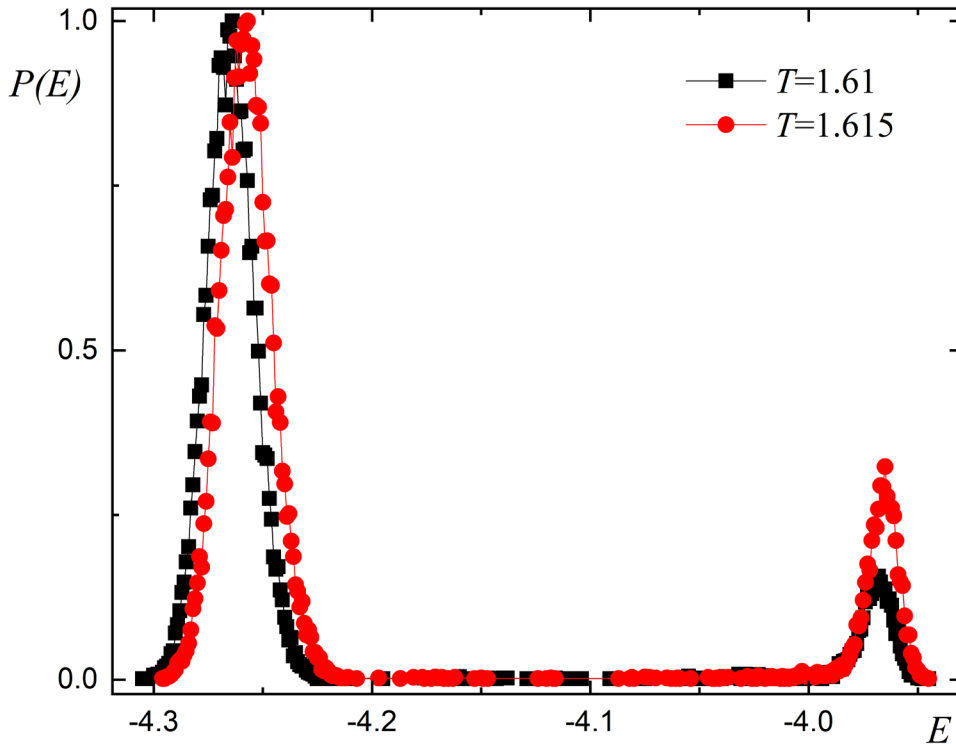


Рис. 3.31. Гистограмма распределения энергии для $h=9.0$.

случае ФП 1 рода на гистограмме наблюдается бимодальное распределение энергии [112]. На рисунке 3.31 приведены гистограммы распределения энергии для системы с линейным размером $L=24$ для значения МП $h=9$. Гистограммы построены при температуре T_C . Видно, что на гистограммах наблюдаются два максимума (бимодальность), которые свидетельствуют в пользу ФП первого рода. Такое же поведение гистограмм наблюдается в диапазоне значения МП $8 \leq h \leq 10.0$.

На рисунке 3.32 представлена фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля h . На диаграмме видно, что в точке $h=7$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная фаза 1-го типа, ферромагнитная и парамагнитная. Черными и красными стрелками обозначены направления спинов в каждой подрешетке. Красные квадраты соответствует ФП первого рода из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Черные квадраты соответствует ФП второго рода из антиферромагнитной фазы 1-го типа в парамагнитную [70,199].

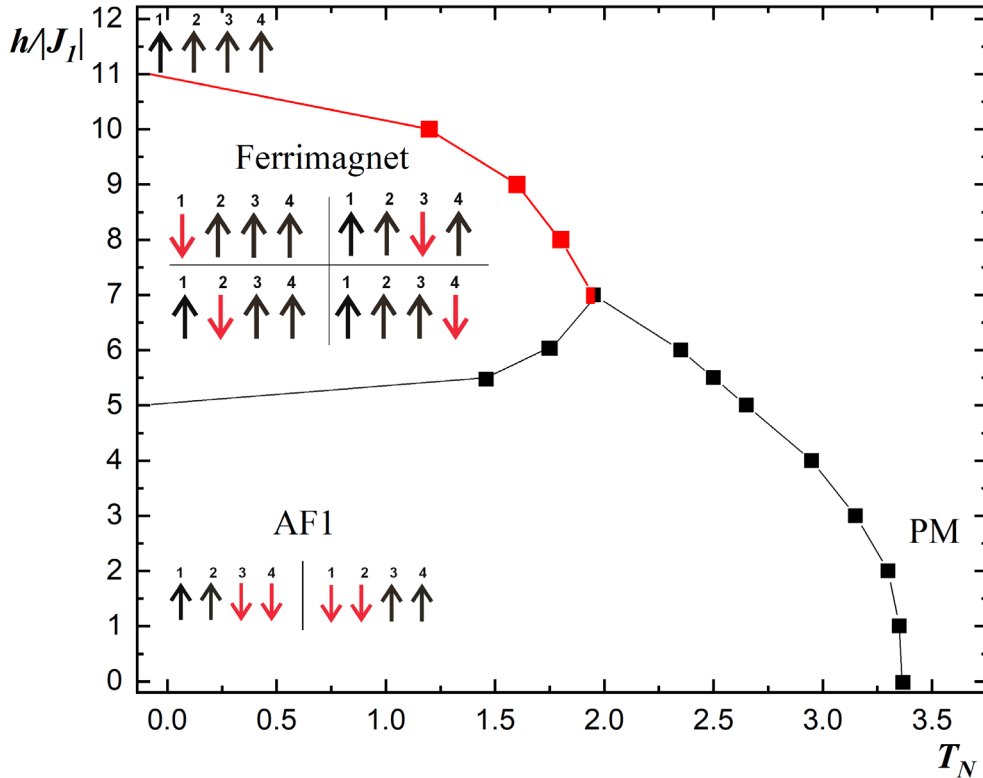


Рис. 3.32. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_1|$. Черными квадратами отмечены точки ФП второго рода. Красными квадратами отмечены точки ФП первого рода ($7.0 \leq h \leq 10.0$).

Каждой фазе соответствуют различные магнитные структуры. Как видно на диаграмме, для значений поля $h < 5$ в основном состоянии наблюдается антиферромагнитное упорядочение, а для полей $5.5 \leq h \leq 10$ – ферримагнитное. В переходном значении МП $h = 5$ антиферромагнитное состояние частично разупорядочено. При $h = 5$ с увеличением температуры происходит ФП 2 рода. При МП $h \geq 11$ в системе подавляется ФП.

Исходя из результатов численного эксперимента можно сказать, что для данной модели для значений магнитных полей $0.0 \leq h \leq 5.0$ происходит ФП 2 рода. Для значений магнитных полей $5.5 \leq h < 7.0$ с увеличением температуры происходят два ФП 2 рода, а для $7.0 < h \leq 10.0$ ФП 1 рода. При значении МП $h = 7$ происходит ФП 2 рода. Увеличение значения магнитного поля для данной модели приводит к образованию дополнительного ФП и смене ФП второго рода на первый. МП $h \geq 11$ приводит к подавлению ФП.

На рисунке 3.33 приведено схематическое изображение магнитных структур основного состояния для исследуемой модели. Структуры получены путем визуализации системы в основном состоянии т.е. при минимальной исследуемой температуре ($T=0.1$). Цифрами на рисунке обозначены номера подрешеток. Красный или черный цвет в узлах решетки обозначают направления спинов «вверх» или «вниз». На этом рисунке буквами от «А» до «F» показаны все возможные магнитные структуры для разных значений магнитных полей.

Как видно на фазовой диаграмме (рис. 3.32), в фазе AF1 могут реализоваться только две структуры основного состояния (рис. 3.33, А-В). В фазе Ferromagnet реализуются четыре структуры основного состояния (рис.

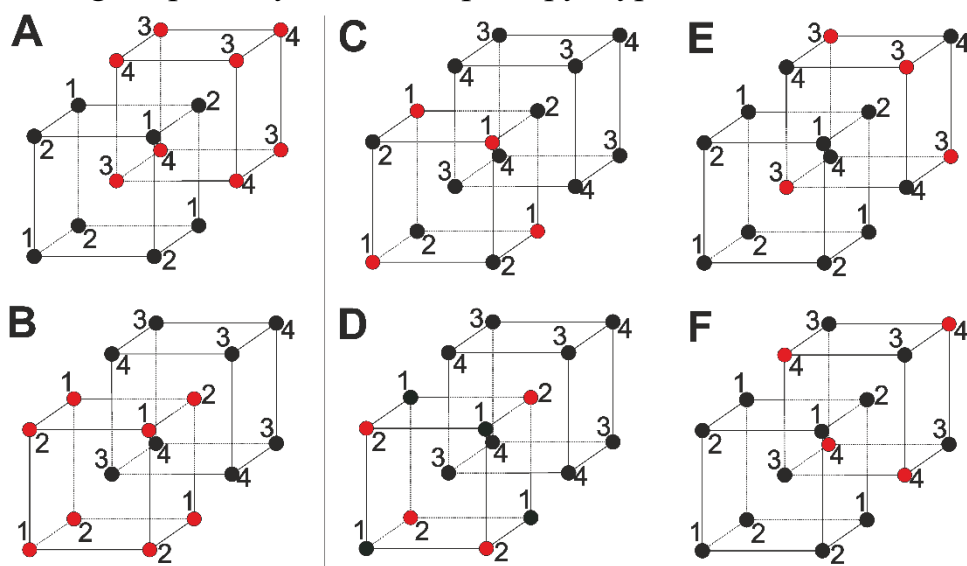


Рис. 3.33. Магнитные структуры основного состояния модели Изинга на ОЦК решетке для с учетом взаимодействия магнитного поля.

3.33, С-F).

Все фазовые диаграммы, полученные в этой главе, качественно совпадают с фазовыми диаграммами представленными в обзорной статье для метамагнетиков с сильной одноосной анизотропией [201]. Для двухподрешеточных метамагнетиков FeCl_2 и FeBr_2 с увеличением температуры наблюдается ФП 2 рода. Далее при увеличении МП, ФП 2 рода меняется на ФП 1 рода. При увеличении МП образуется смешанная фаза - антиферромагнитная с парамагнитным [202, 203]. Также для

двухподрешеточных метамагнетиков на полевых зависимостях намагниченности образуются два плато, которые исчезают с ростом температуры [202].

Схожие результаты смены ФП 2 рода на ФП 1 рода с увеличением значения МП получены и в работе [204] для метамагнетика $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Результаты экспериментальных исследований для четырехподрешеточного метамагнетика CeV_i указывают, что при увеличении значения магнитного поля на фазовой диаграмме возникают ферримагнитные структуры. Для этих же метамагнетиков на полевых зависимостях намагниченности при низких температурах возникают плато, которые размываются с ростом температуры [205-207]. В обзорной работе [201] представлены экспериментальные результаты по исследованиям метамагнетиков. В данном обзоре представлен ряд экспериментальных данных для двух, четырех подрешеточных систем, где в системе наблюдаются два ФП, что хорошо согласуется полученными в данной диссертации результатами.

ГЛАВА 4. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

4.1. Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга в антиферромагнитном состоянии 2-го типа.

Одним из наиболее интенсивно исследуемых моделей с конкурирующими взаимодействиями является антиферромагнитная модель Гейзенберга. К настоящему моменту времени, эта модель достаточно хорошо изучена как для квантовых, так и для классических систем. Но большинство работ посвящено исследованиям на треугольных решетках или двумерным системам [212-217].

Трехмерная модель Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом конкурирующих обменных взаимодействий, изучалась разными методами. Термодинамические свойства квантовой антиферромагнитной модели Гейзенберга с учетом взаимодействия первых ближайших соседей J_1 и вторых ближайших соседей J_2 со спиновой и одноионной анизотропией на ОЦК решетке описаны в работах [71, 72]. Используя метод функции Грина второго порядка в рамках приближения случайных фаз исследована область, где $J_2/J_1 < 2/3$, т.е. фаза Нееля. Анализируется влияние фрустрации на характер температурной зависимости намагниченности подрешетки. Проведен анализ влияния спиновой и одноионной анизотропии на намагниченность подрешеток, температуру Нееля, свободную и внутреннюю энергию. В ряде работ проведена оценка влияния вторых ближайших соседей J_2 на критическую температуру для моделей Гейзенберга на ОЦК решетке с ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями разными методами и алгоритмами: высокотемпературным разложением для структурного фактора [73], с помощью функции Грина второго порядка [218], с помощью анализа высокотемпературных разложений подрешеточной восприимчивости [160]. В

работах [211, 219] методом МК проведен подробный анализ влияния J_2 на критическую температуру и на род ФП. Получены структуры основного состояния в широком диапазоне значений $k=J_2/J_1$. На рисунке 4.1 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей для антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке без учета внешнего МП. Качественно данная фазовая диаграмма совпадает с диаграммой для модели Изинга (рисунок 3.2). На диаграмме (рис. 4.1) красными точками обозначена область ФП первого рода, а синими точками обозначена область ФП второго рода. Для данной модели при значениях обменных взаимодействий $0.0 \leq k \leq 0.6$ и $0.8 \leq k \leq 1.0$. с ростом температуры происходит ФП 2 рода, а для значений $2/3 < k \leq 0.75$ реализуется ФП 1 рода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную [208, 211]. В антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке без учета внешнего МП было показано, что в области соотношений обменных взаимодействий $0.0 \leq k < 2/3$ система упорядочена как антиферромагнитная фаза 1-го типа -AF1, а в области $2/3 < k \leq 1$ как антиферромагнитная фаза 2-го типа - AF2 [62]. Аналогичная картина наблюдается и в работе [24].

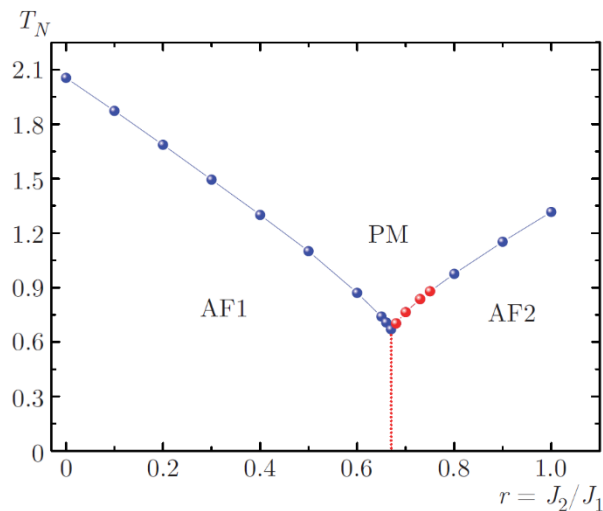


Рис. 4.1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от отношения взаимодействия вторых ближайших соседей к первым r [211].

Также для антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке рассчитаны значения всех основных статических КИ в области ФП 2 рода. В интервале соотношений обменных взаимодействий $0.0 < k < 0.6$ модель

демонстрирует универсальное критическое поведение и принадлежит к тому же классу универсальности, что и трехмерная модель Гейзенберга. Изменение обменного взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $0.8 \leq k \leq 1.0$ приводит к неуниверсальному критическому поведению [208, 211].

Невыясненными остаются вопросы, связанные с влиянием внешнего МП на ФП, термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитных моделей Гейзенберга. В работе [209] показано, что в двумерной треугольной модели Гейзенберга в области малых магнитных полей при $h = 2$ параметры порядка для симметрий Z_3 и $O(2)$ демонстрируют поведение, типичное для ФП второго рода и Костерлица–Таулеса соответственно, с различными температурами перехода. В области сильного поля, где $3 \leq h \leq 9$ параметр порядка для симметрии Z_3 демонстрирует поведение характерное для ФП второго рода, в то время как другой параметр порядка, связанный с компонентами, перпендикулярными полю, указывает на ФП второго рода, а не переход Костерлица–Таулеса.

Результаты исследований модели Гейзенберга в магнитном поле полученные с использованием теории среднего поля и численного метода приведены в работах [24-26]. В работе [24] представлена фазовая диаграмма Гейзенберговского антиферромагнетика на треугольной решетке с взаимодействиями ближайших J_1 и следующих ближайших J_2 соседей при наличии внешнего МП. Показано, что классическая модель Гейзенберга имеет случайное вырождение для всех соотношений J_2/J_1 . Обнаружено, что вырождение снимается квантовыми флуктуациями. В работе [26] обнаружено, что квантовый механизм «порядок–беспорядок» стабилизирует три различные фазы в зависимости от напряженности поля, пока система не достигнет магнитного насыщения. При более сильных полях авторы обнаружили неожиданную нематическую природу, обусловленную нетривиальным частичным нарушением симметрии. Кроме того, обнаружено, что сильная нематическая природа низкополевой и высокополевой фаз приводит к возникновению дробных вихрей и антивихрей.

Исследования фазовых переходов, трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле показало, что для всех значений МП в интервале $0 \leq h \leq 10$ реализуется фазовый переход второго рода и дальнейшее увеличение МП приводило к размыванию ФП. С увеличением величины внешнего МП угол между спинами и направлением магнитного поля уменьшается. Когда величина магнитного поля достигается $h \geq 12$ угол между спинами становится нулевым [210].

Исследования классической модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей при наличии внешнего магнитного поля до сих пор не проводились. Вопросы связанные с влиянием МП на ФП и термодинамические свойства данной модели на сегодняшний день остаются открытыми.

В этой главе мы рассмотрим результаты исследования антиферромагнитных моделей Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей при наличии внешнего МП. Будут рассмотрены результаты исследований данной модели для случая $k=J_2/J_1=1$ и $k=J_2/J_1=0.5$.

Гамильтониан системы может быть представлен в следующем виде [6]:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_l) - h \sum_{\langle i \rangle} \vec{S}_i \quad (4.1)$$

где \vec{S}_i - трехкомпонентный единичный вектор $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Первый член в формуле учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей $J_1 < 0$, а второй – следующих за ближайшими соседями $J_2 < 0$. h - величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). Магнитное поле менялось в интервале $0.0 \leq h \leq 20.0$ и направлена вдоль направления оси z . В данном параграфе главы рассмотрим случай, когда $J_2=J_1=-1.0$, $k=J_2/J_1=1$.

Здесь и далее в данной главе для исследования был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК [111]. Для определения рода ФП и критических температур также был использован метод

кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа Монте-Карло данных.

Для построения кривых кумулянтов Биндера использовалось выражение (3.4). В этой главе для наблюдения за температурным ходом теплоемкости было использовано соотношение (3.2). Магнитная восприимчивость вычислялась по формуле [130]:

$$\chi = \begin{cases} (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), & T < T_N \\ (NK)\langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases} \quad (4.1)$$

где $K = |J_1|/k_B T$, N -количество частиц в системе, m – параметр порядка, T_N – критическая температура.

Параметр порядка системы определялся по формуле:

$$\bar{m} = 3\bar{m}_1 - \bar{m}_2 - \bar{m}_3 - \bar{m}_4 \quad (4.2)$$

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

Намагниченность вычислялась по формуле:

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\langle i \rangle} \bar{S}_i \quad (4.3)$$

В данной главе диссертационной работы расчёты проводились с использованием периодических граничных условий и линейными размерами $L=12 \div 24$, $N=2 \times L \times L \times L$, где N -количество частиц (спинов) в системе, L -размер системы измеряемая в элементарных ячейках. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 2.5 \cdot 10^4$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 20\tau_0$ МК шагов на спин.

Температурные зависимости для теплоемкости и восприимчивости приведены на рисунках 4.2 и 4.3. Отметим, что рост значения h сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается спад абсолютных значений максимумов теплоемкости и незначительный рост абсолютных значений восприимчивости. Очевидно, что это связано с подавлением флуктуаций с увеличением магнитного поля. Рост абсолютных значений магнитной восприимчивости (рис. 4.3) с ростом значения МП связан с тем, что

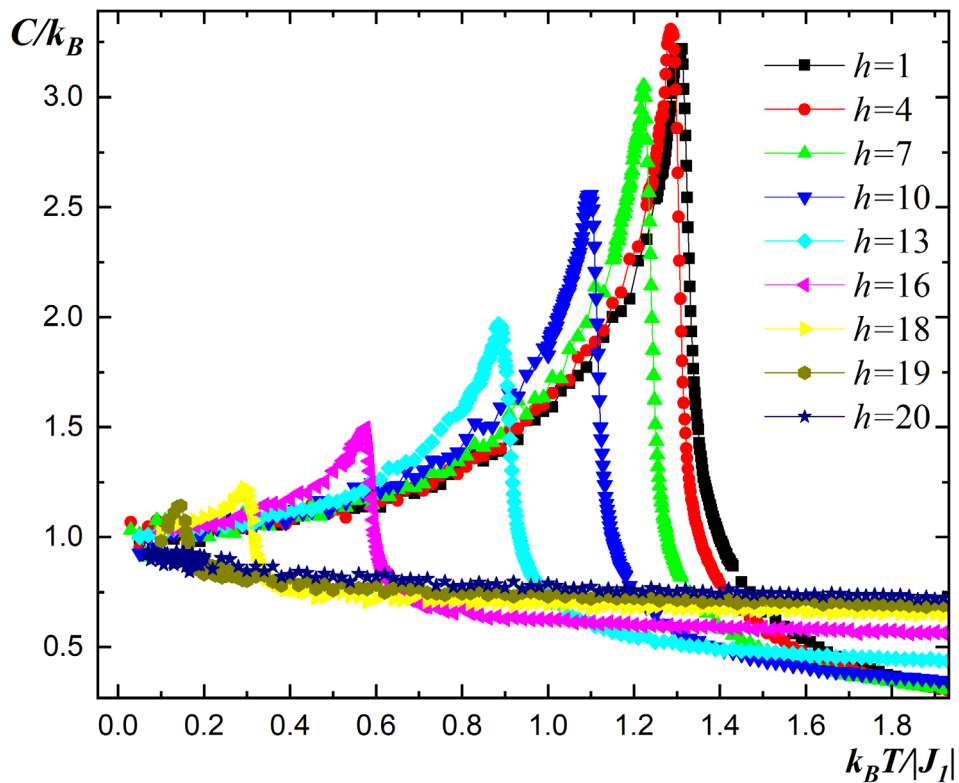


Рис. 4.2. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_I|$ для разных значений h .

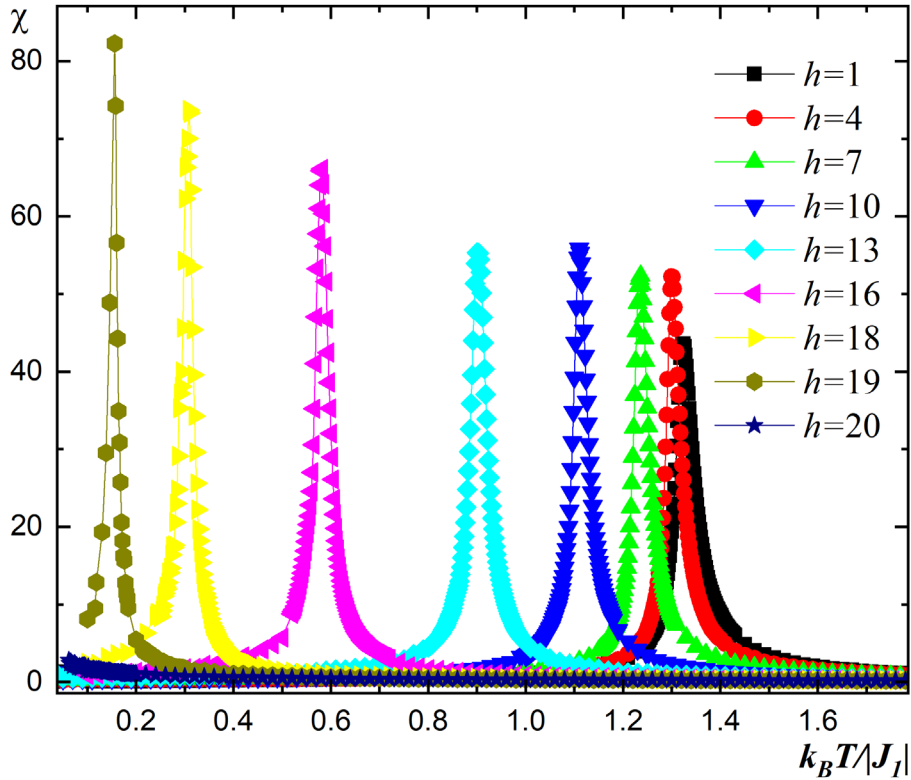


Рис. 4.3. Зависимость магнитной восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h .

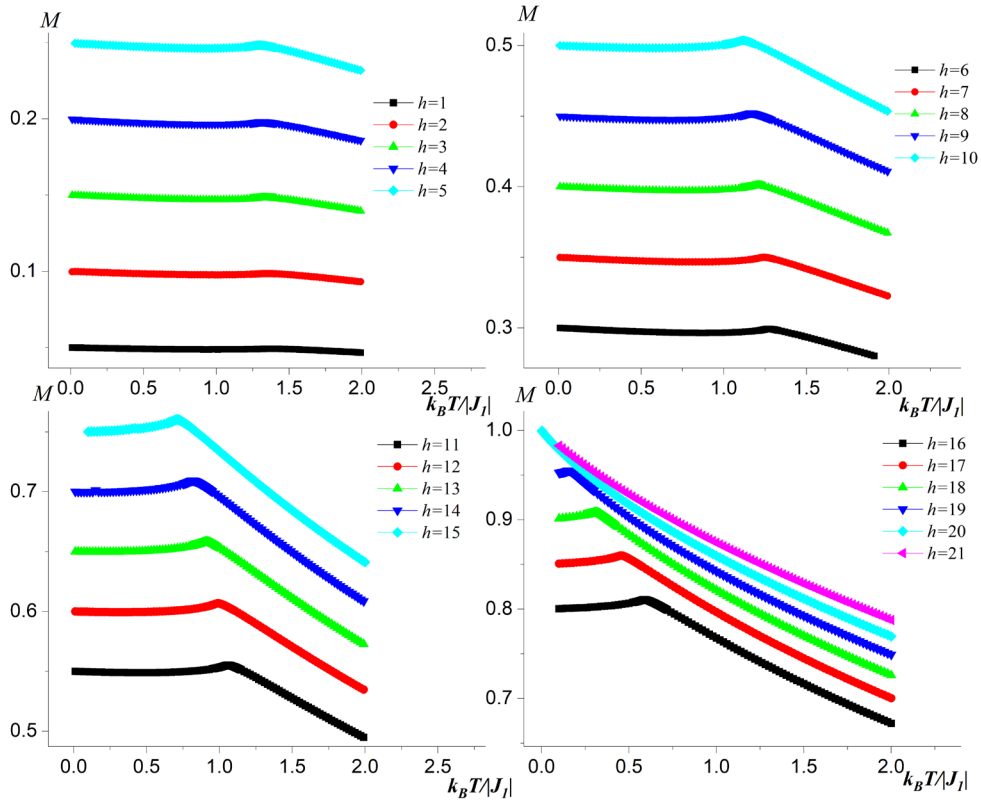


Рис. 4.4. Зависимости намагниченности M от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h .

происходит рост флуктуаций намагниченности в точке ФП. Рост значения

магнитного поля смещает температуру упорядочения к более низким значениям. На рисунке 4.2 и 4.3 на зависимости теплоемкости и восприимчивости видно, что с увеличением МП температура ФП стремится к нулю и в конце концов размывается ФП.

Температурные зависимости намагниченности для разных значений величины магнитного поля h приведены на рисунке 4.4. Видно, что с увеличением величины магнитного поля намагниченность системы плавно растет. С ростом температуры намагниченность практически не меняется до точки ФП. После температуры ФП спадает из-за больших флуктуаций. При значениях МП $h \geq 20.0$ в области низких температур намагниченность m стремится к единице. Это говорит о том, что все спины в системе выстраиваются вдоль направления внешнего магнитного поля и система становится полностью упорядоченной.

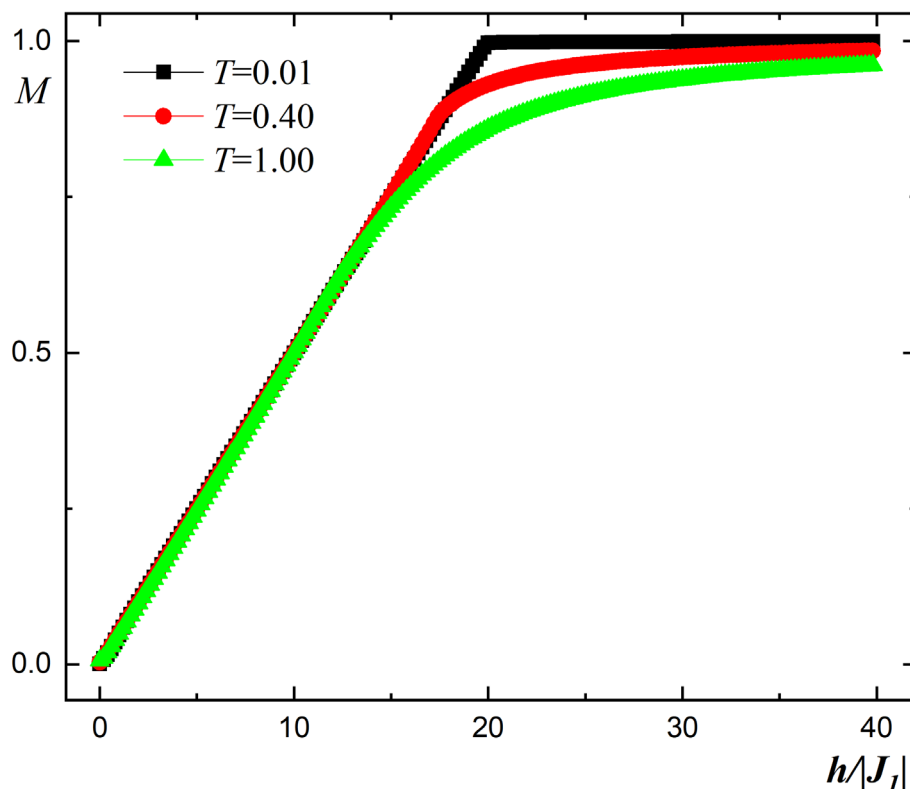


Рис. 4.5. Зависимость намагниченности M от магнитного поля $h/|J_1|$ для разных значений температур.

На рисунке 4.5 представлена зависимость намагниченности M от величины МП для разных значений температур. В отличие от модели Изинга на ОЦК решетке в модели Гейзенберга не наблюдается плато

намагниченности. Для основного состояния при $T=0.01$ с ростом поля намагниченность растет прямолинейно и достигает до значения $M=1$. Можно заметить, что для температур $T=0.4$ и 1.0 не достигается полное насыщение намагниченности при том же значении поля что и для $T=0.01$.

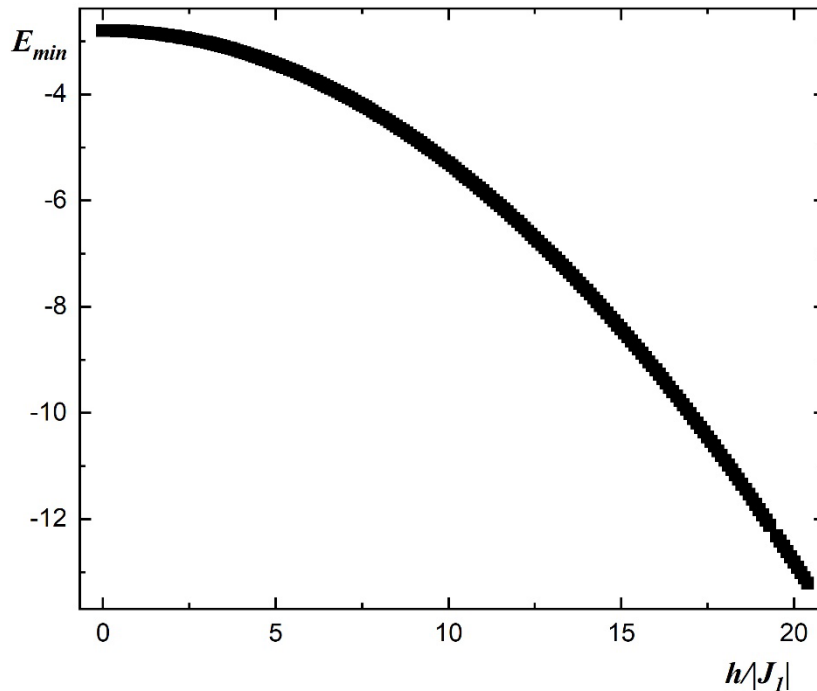


Рис. 4.6. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля $h/|J_1|$.

На рисунке 4.6 представлена зависимость минимальной энергии E_{min} системы от величины магнитного поля. E_{min} -соответствует энергии реплики с наименьшей температурой. Здесь также мы наблюдаем плавный спад минимальной энергии с ростом величины магнитного поля. С ростом МП в системе плавно нарушается антиферромагнитное упорядочение.

Для определения рода ФП и критических температур для всех рассмотренных значений МП для данной модели также был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка (3.4).

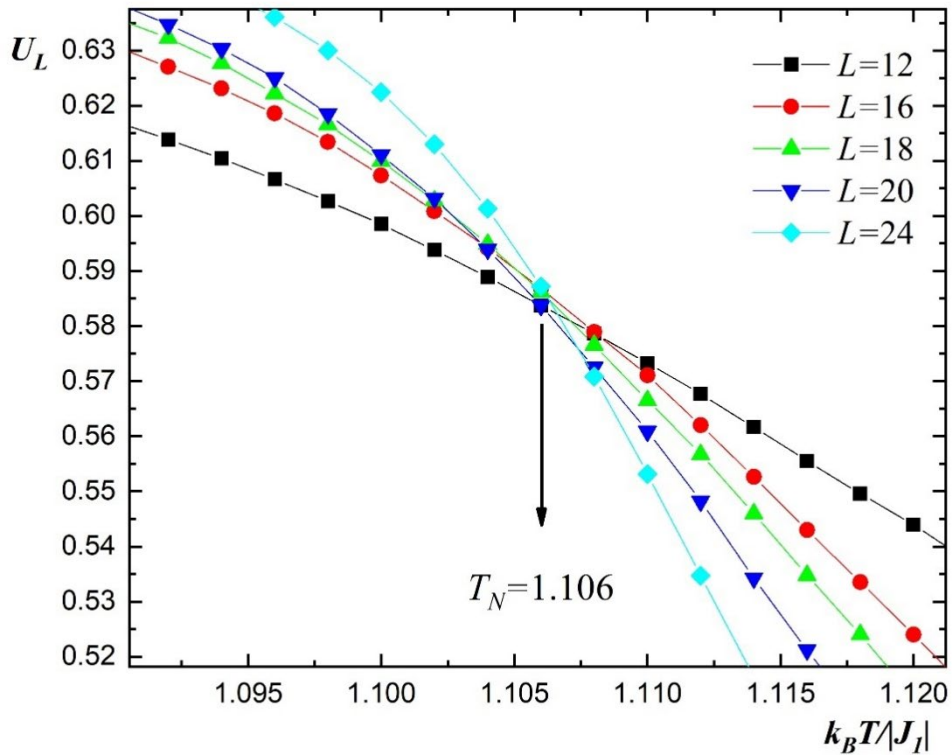


Рис. 4.7. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=1.0$.

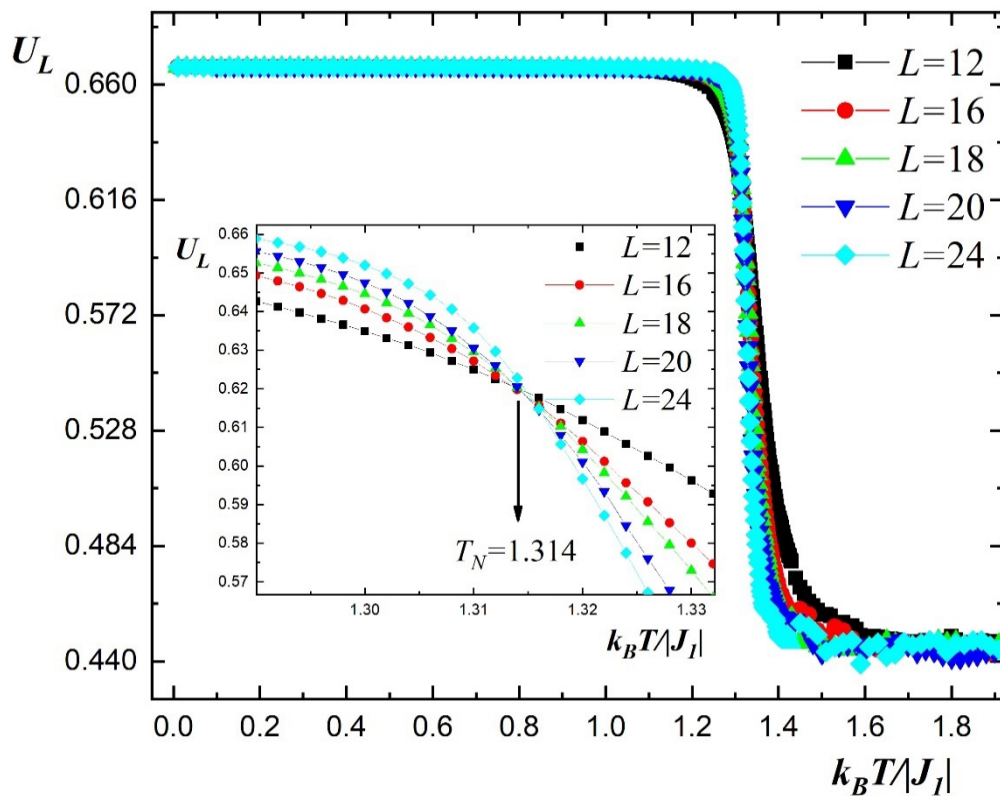


Рис. 4.8. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=10.0$.

На рисунках 4.7 и 4.8 представлены зависимости кумулянтов Биндера

четвертого порядка U_L для разных размеров системы L при значении магнитного поля $h=1.0$ и 10.0 соответственно. На рисунках видны отчетливые точки пересечения кривых (для $h=1.0$ - $T_N=1.314$, а для $h=10.0$ - $T_N=1.106$), которая свидетельствует, что в системе реализуется ФП второго рода. Точка пересечения кривых кумулянтов Биндера является критической температурой. Аналогичные зависимости кумулянтов Биндера были построены для всех значений магнитного поля в интервале $0.0 \leq h \leq 19.0$. Анализ наших результатов показывает, что в интервале $0.0 \leq h \leq 19.0$ наблюдается ФП второго рода.

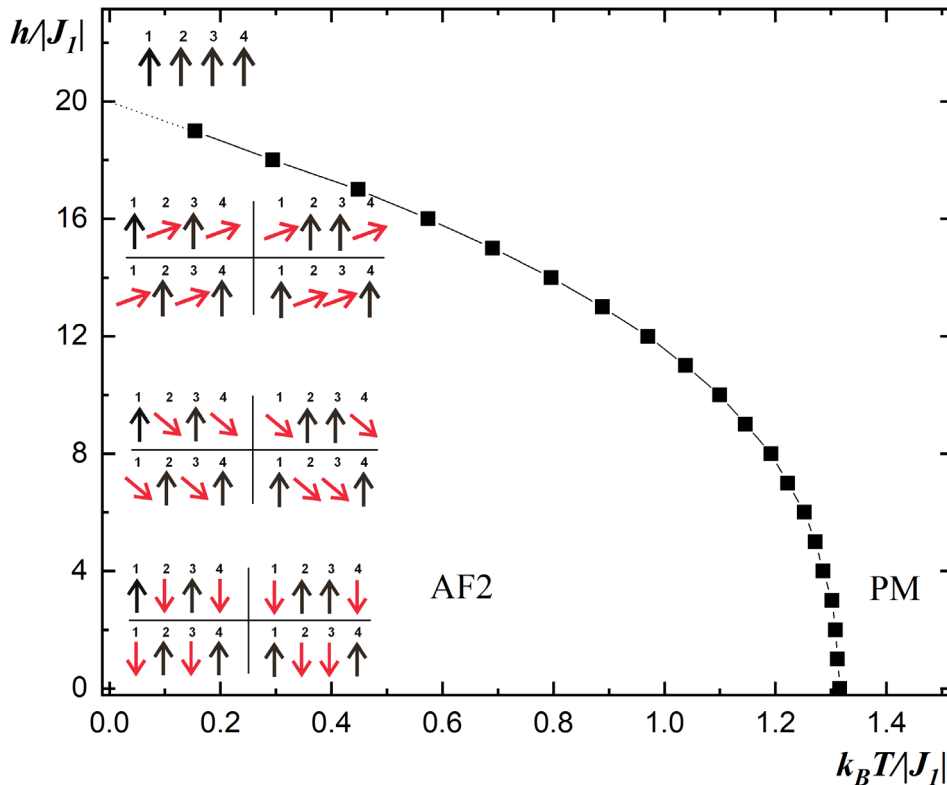


Рис. 4.9. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_I|$. Квадратами отмечены точки ФП второго рода ($0.0 \leq h \leq 19.0$).

На рисунке 4.9 показана фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля h . Черными и красными стрелками обозначены направления спинов в каждой подрешетке, а цифры над стрелками указывают на номер подрешетки. При небольшом или нулевом значении магнитного поля система упорядочена как антиферромагнетик 2-го

типа [125]. Как показано на рисунке 4.9. с увеличением значения МП две противоположенные подрешетки плавно поворачиваются по направлению магнитного поля и при значении магнитного поля $h=20$ система находится в ферромагнитном состоянии. Дальнейшее увеличение магнитного поля $h \geq 20$ подавляет ФП.

Анализ результатов показывает, что во всем интервале значений магнитных полей $0.0 \leq h \leq 19.0$ в системе реализуется ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы-AF2 в парамагнитную фазу РМ. С увеличением значения магнитного поля антиферромагнитная фаза основного состояния плавно переходит в ферромагнитную фазу.

4.2. Влияние магнитного поля на фазовые переходы и магнитные свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга в антиферромагнитном состоянии 1-го типа.

В данном параграфе главы рассмотрим исследования по влиянию магнитного поля на термодинамические свойства и фазовые переходы антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих за ближайшими соседями для случая, когда $J_1=-1$, $J_2=-0.5$, $k=J_2/J_1=0.5$.

Отметим, что для этой модели ($k=J_2/J_1=0.5$) без наличия МП система в основном состоянии имеет антиферромагнитное упорядочение 1-го типа (рис 4.1) [211]. В данной модели Гейзенберга без наличия МП с повышением температуры происходит ФП 2 рода.

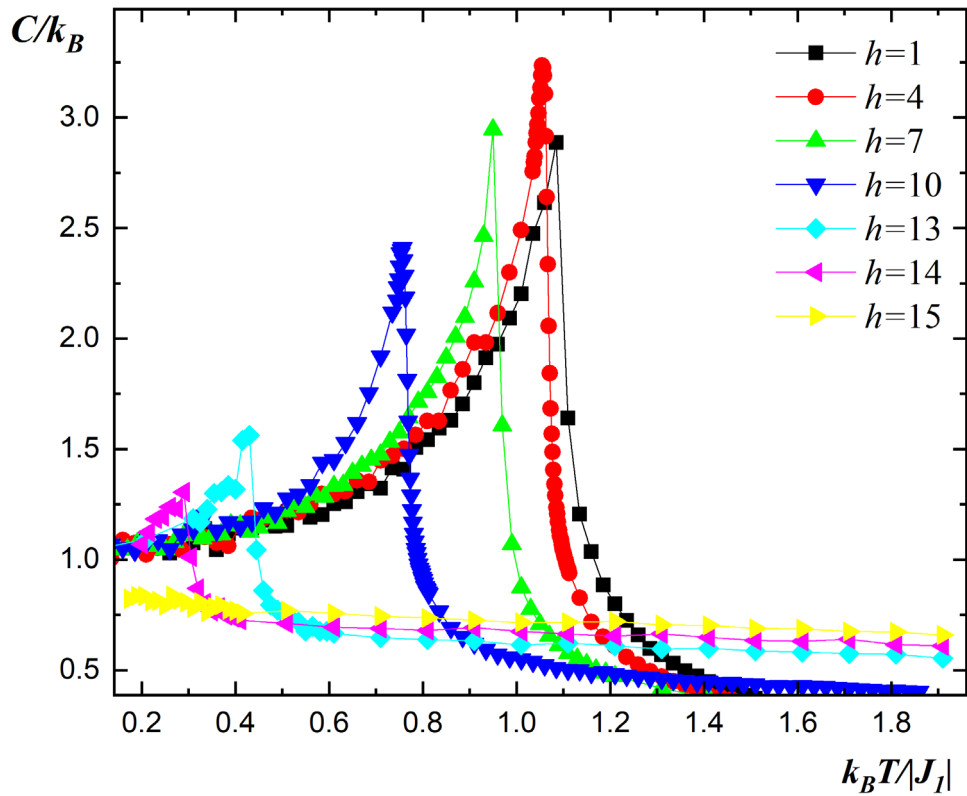


Рис. 4.10. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_I|$ для разных значений h .

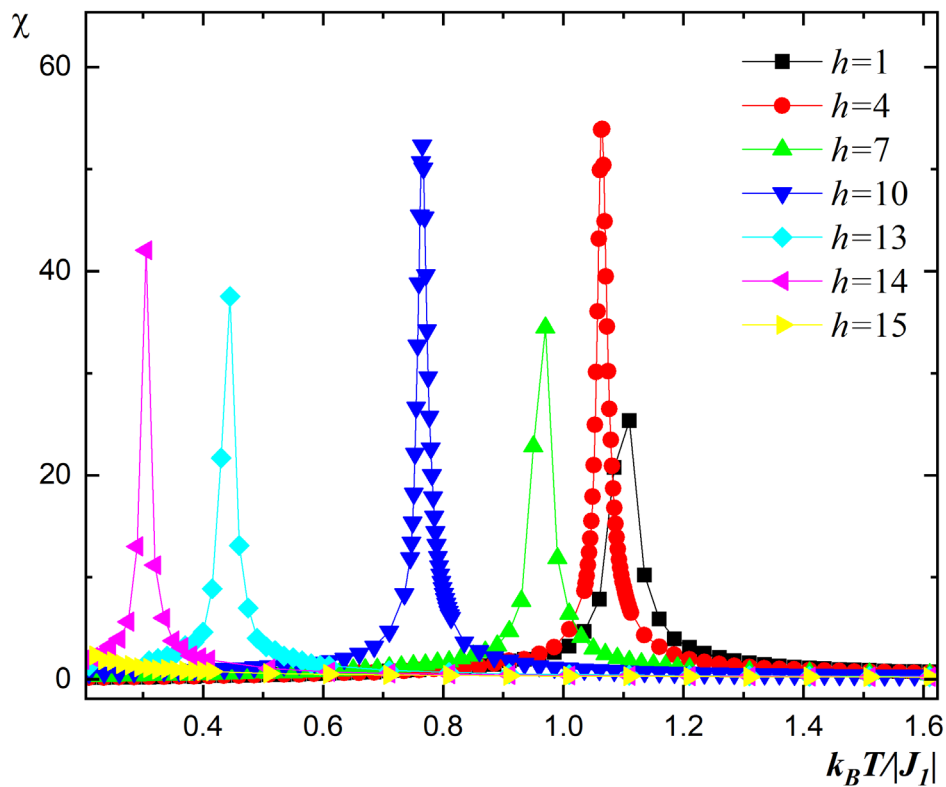


Рис. 4.11. Зависимость магнитной восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J_I|$ для разных значений h .

Температурные зависимости для теплоемкости приведены на рисунке

4.10. Рост значения h сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается спад абсолютных значений максимумов теплоемкости. Очевидно, что это связано с подавлением флуктуаций систем с увеличением МП. Рост значения внешнего магнитного поля делает систему восприимчивой при более низких температурах. На рисунке 4.10 на зависимости теплоемкостей видно, что с увеличением МП температура ФП стремится к нулю и в конце концов размывается ФП.

Температурные зависимости магнитной восприимчивости для разных значений величины магнитного поля h приведены на рисунке 4.11. На зависимостях восприимчивости также видно, что максимумы смещаются в область низких температур. Для некоторых значений МП происходит рост абсолютных значений максимумов восприимчивости. Это связано с ростом флуктуаций намагниченности при температуре вблизи ФП. Видно, что для значения внешнего МП $h=15$ максимум на графике магнитной восприимчивости исчезает т.е. происходит подавление ФП магнитным полем.

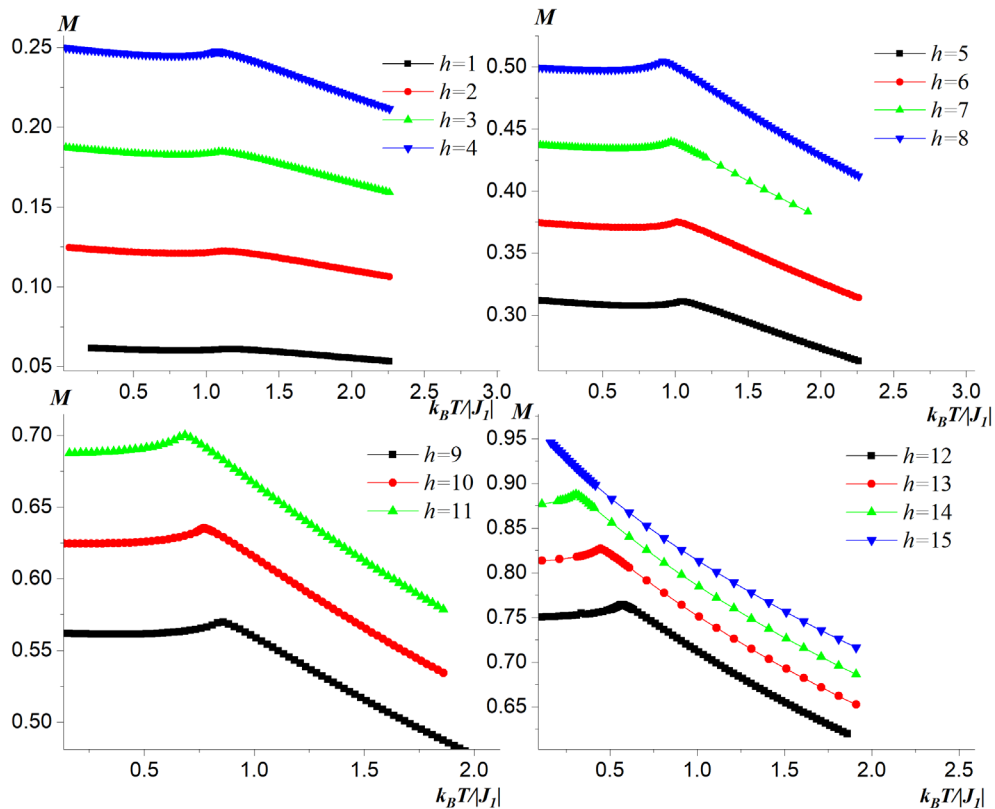


Рис. 4.12. Зависимости намагниченности M от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных значений h .

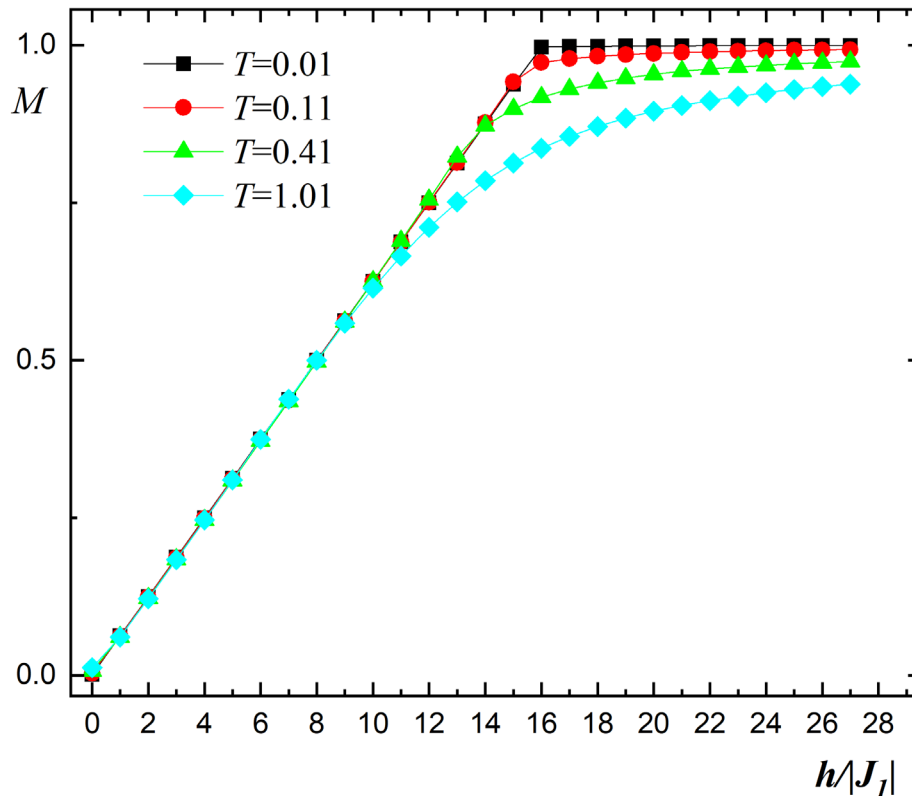


Рис. 4.13. Зависимость намагниченности M от магнитного поля $h/|J_1|$ для разных значений температур.

Температурные зависимости намагниченности для разных значений величины магнитного поля h приведены на рисунке 4.12. Видно, что с увеличением величины магнитного поля намагниченность системы плавно растет. С ростом температуры намагниченность практически не меняется до температуры ФП после чего спадает из-за сильных флуктуаций. При значениях МП $h \geq 20.0$ в области низких температур намагниченность m стремится к единице. Это говорит о том, что все спины в системе выстраиваются вдоль направления внешнего магнитного поля и система становится полностью ферромагнитно упорядоченной. На рисунке 4.13 представлена зависимость намагниченности M от величины МП для разных значений температур. В отличие от модели Изинга на ОЦК решетке в модели Гейзенберга не наблюдаются плато намагниченности. Это означает, что в модели Гейзенберга не возникают устойчивые промежуточные(ферромагнитные) структуры по мере роста МП, а система плавно из антиферромагнитного состояния переходит в ферромагнитное

состояние. Для основного состояния при $T=0.01$ с ростом значения внешнего МП намагниченность растет прямолинейно и доходит до значения $M=1$. Можно заметить, что для температур $T=0.4$ и 1.0 полное насыщение намагниченности достигается при бóльших значениях МП, т.е. спиновые флуктуации частично нарушают ферромагнитное состояние.

На рисунке 4.14 представлена зависимость минимальной энергии E_{min}

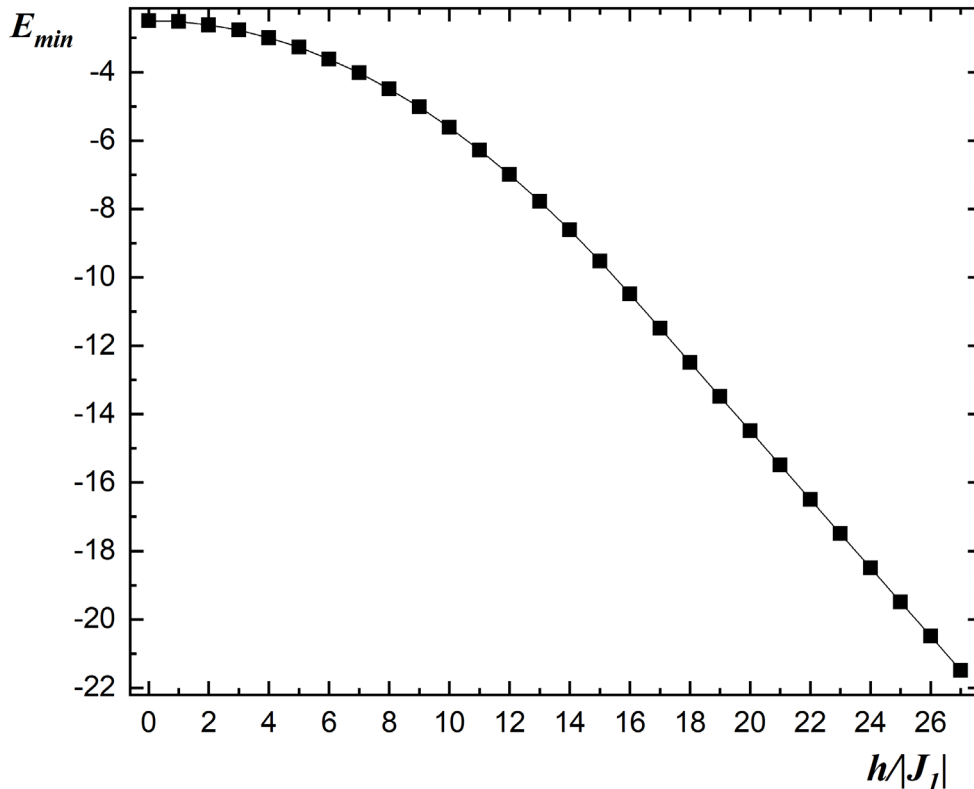


Рис. 4.14. Зависимость минимальной энергии E_{min} от магнитного поля $h/|J_1|$.

системы от величины магнитного поля. E_{min} -соответствует энергии реплики с наименьшей температурой ($T=0.01$). Здесь также на рисунке мы наблюдаем плавный спад минимальной энергии с ростом величины магнитного поля. С ростом МП в системе плавно разрушается антиферромагнитное упорядочение.

Для анализа природы ФП использовался метод кумулянтов Биндера 4-го порядка и гистограммный метод анализа МК данных. Согласно методу кумулянтов Биндера при ФП 2 рода кривые для разных линейных размеров

имеют, хорошо выраженную точку пересечения [197, 198]. Также этот метод можно использовать для определения температуры ФП с большой точностью.

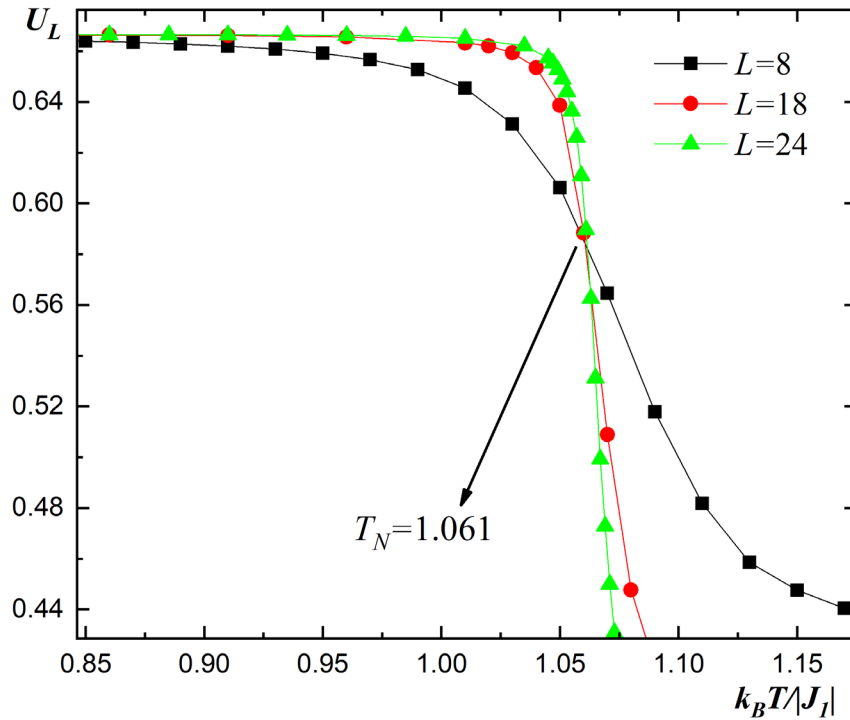


Рис. 4.15. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=4.0$.

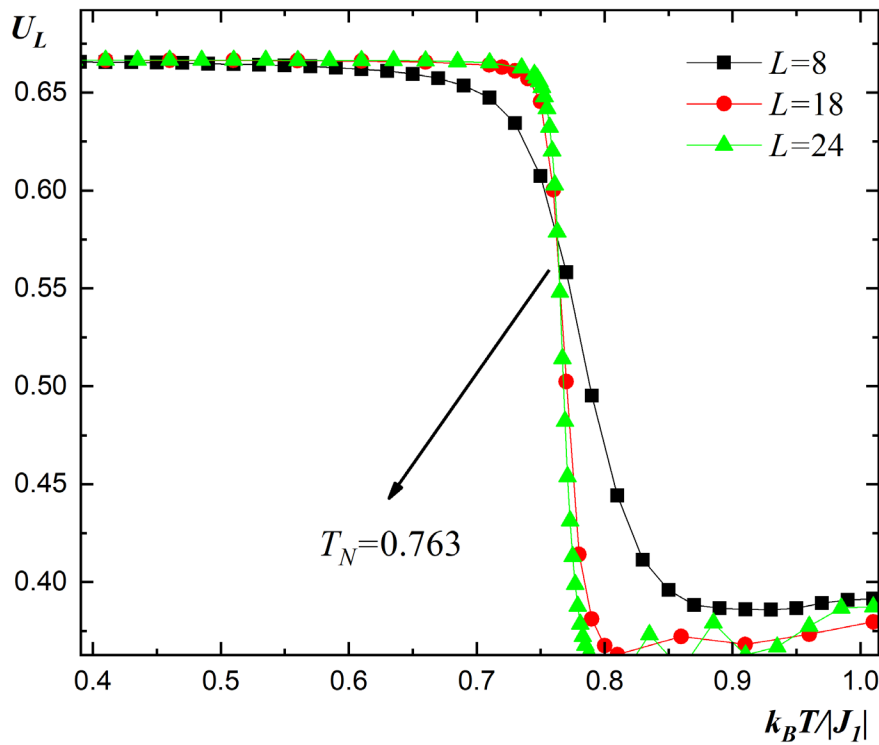


Рис. 4.16. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_I|$ для разных L при $h=10.0$.

На рисунках 4.15 и 4.16 представлены температурные зависимости кумулянта Биндера по намагниченности четвертого порядка U_L для разных линейных размеров системы L при значении магнитного поля $h=4.0$ и 10.0 соответственно. На рисунках видны отчетливые точки пересечения кривых (для $h=4.0$ $T_N=1.061$ и для $h=10.0$ $T_N=0.763$), которые свидетельствует о том, что в системе реализуется ФП второго рода. Точка пересечения кривых кумулянтов Биндера для разных линейных размеров L является критической температурой. Аналогичные зависимости кумулянтов Биндера были построены для всех значений магнитного поля в интервале $0.0 \leq h \leq 14.0$. Анализ полученных результатов показывает, что в интервале $0.0 \leq h \leq 14.0$ наблюдается ФП второго рода.

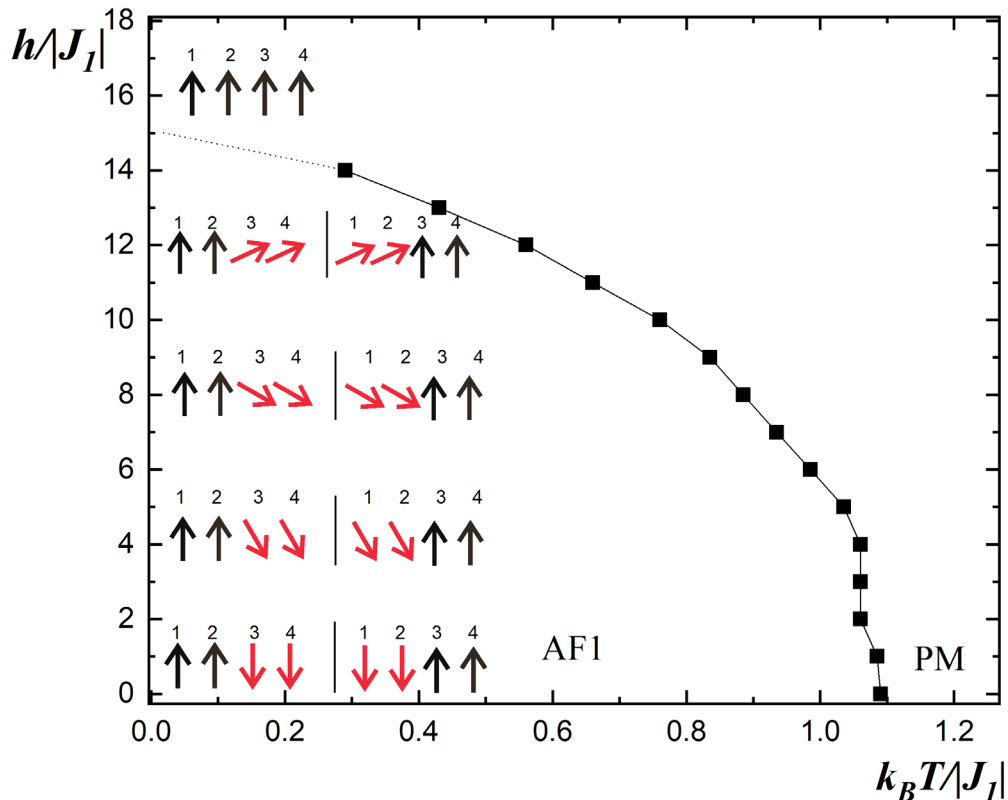


Рис. 4.17. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от магнитного поля $h/|J_1|$. Квадратами отмечены точки ФП второго рода ($0.0 \leq h \leq 19.0$).

На рисунке 4.17 показана фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины магнитного поля h . Черными и красными стрелками обозначены направления спинов в каждой подрешетке, а цифры над стрелками указывают на номер подрешетки. При небольшом или нулевом

значении магнитного поля система упорядочена как антиферромагнитная фаза 1-го типа - AF1 [125]. С увеличением значения МП две противоположно направленные подрешетки (красные стрелки на рис 4.17) плавно поворачиваются вдоль направления магнитного поля и при значении магнитного поля $h \geq 15$ система переходит в ферромагнитное состояние. ФП 2 рода сохраняется до достижения МП $h=14$. Дальнейшее увеличение магнитного поля $h \geq 15$ подавляет ФП.

Анализ результатов показывает, что во всем интервале значений магнитных полей $0.0 \leq h \leq 14.0$ в системе реализуется ФП 2 рода из AF1 в парамагнитную фазу. Основное состояние системы с увеличением значения МП плавно переходит из антиферромагнитной фазы в ферромагнитную фазу.

Заключение

В настоящей работе проведено исследование особенностей ФП, термодинамических и магнитных свойств антиферромагнитных спиновых моделей с конкурирующими взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля на основе высокоэффективного репличного обменного алгоритма метода МК. С использованием этого алгоритма исследованы антиферромагнитные модели Изинга и Гейзенберга с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей на ОЦК решетке при наличии магнитного поля. Получены температурные и полевые зависимости основных термодинамических параметров для этих моделей. Определен род фазового перехода в широком интервале магнитного поля.

Основные оригинальные результаты диссертационной работы:

1. изучены особенности влияния магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей в случае $k=J_2/J_1=1$. Проведена оценка влияния магнитного поля на фазовые переходы в данной модели. Показано, что в интервале магнитного поля $0.0 \leq h \leq 10.0$ происходит фазовый переход второго рода, а в интервале $11.0 \leq h \leq 13.7$ фазовый переход первого рода. Для этой же модели обнаружены значения магнитного поля $h=6$ и $h=14$, где происходит частичное разупорядочение основного состояния. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины магнитного поля для данной модели. Определены магнитные структуры основного состояния;
2. проведены исследования антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями при наличии внешнего магнитного поля для случая $k=2/3$. Получены температурные и полевые зависимости основных термодинамических параметров. Определен род фазового перехода для значений магнитных полей в интервале $0.0 \leq h \leq 11.0$. Показано, что в интервале МП $0.0 \leq h \leq 2.7$

происходит ФП 2 рода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную. Обнаружено, что в интервале МП $2.8 \leq h \leq 4.0$ в системе происходят два ФП: сначала ФП 1 рода из антиферромагнитной фазы в ферримагнитную далее ФП 2 рода из ферримагнитной фазы в парамагнитную. А в интервале МП $5.0 \leq h \leq 11.0$ происходит ФП 1 рода. Обнаружены значения магнитного поля $h=4$ и $h=12$, где происходит частичное разупорядочение основного состояния. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины МП для этой модели;

3. получены температурные и полевые зависимости основных термодинамических параметров для антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей для случая $k=0.5$. Для данной модели определен род фазового перехода в широком интервале значений магнитного поля. В интервале МП $0.0 \leq h \leq 5.0$ в системе происходит ФП 2 рода, а в интервале МП $5.0 < h \leq 7.0$ происходят два ФП 2 рода: из ферримагнитной фазы в AF1 и далее из AF1 в парамагнитную фазу. В области МП $8 \leq h \leq 10.0$ происходит ФП 1 рода. Найдены значения МП $h=5$ и $h=10$ при которых происходит частичное разупорядочение основного состояния. Для этой модели также построена фазовая диаграмма зависимости T_N от величины МП и выявлены структуры основного состояния;
4. проведены исследования антиферромагнитных моделей Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей в случае $k=1$ и $k=0.5$ при наличии внешнего магнитного поля. Получены зависимости теплоемкости C , восприимчивости χ , намагниченности M от температуры для разных значений МП. Также построены зависимости намагниченности M и минимальной энергии E_{min} от величины магнитного поля. Определен род фазового перехода в большом интервале магнитных полей и показано, что реализуется ФП 2 рода. Получены магнитные структуры основного состояния. Построены фазовые диаграммы зависимости критической температуры от величины

магнитного поля антиферромагнитных моделей Гейзенберга на ОЦК решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями при $k=1$ и $k=0.5$;

Полученные результаты при выполнении данной работы, использованные алгоритмы, методы расчета создают надежную базу для исследования в области вычислительной физики спиновых моделей с конкурирующими взаимодействиями и магнитными полями.

В заключении выражаю благодарность за помощь, консультацию и наставление моему научному руководителю член-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук, профессору Муртазаеву Акаю Курбановичу. Также выражаю благодарность кандидатам физико-математических наук Рамазанову Магомедшейху Курбановичу и Магомедову Магомеду Алиевичу. Спасибо всему дружному коллективу лаборатории «вычислительной физики и физики фазовых переходов» и коллективу лаборатории «математического моделирования конденсированных сред» Института физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук за совместное обсуждение результатов моих исследований.

Спасибо друзьям и коллегам, которые работают в Институте физики ДФИЦ РАН за советы и проявленный интерес к моим идеям и исследованиям.

Также выражаю благодарность своим родителям, супруге и друзьям, которые поддерживали меня и мой интерес к науке.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ И РАБОТ АВТОРА**Статьи, индексируемые в Web of Science и Scopus:**

- A1. Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Kurbanova D. R., Magomedov M. A., Murtazaev K. Sh. Phase diagrams and ground-state structures of the antiferromagnetic materials on a body-centered cubic lattice. // *Materials Letters* 236 (2019) P.669–671.
- A2. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Муртазаев К.Ш., Магомедов М.А., Бадиев М.К. Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели изинга на объемно-центрированной кубической решетке // *Физика твердого тела* 62 (2020) С. 229-233
- A3. Муртазаев А.К., Кассан-Оглы Ф.А., Рамазанов М.К., Муртазаев К. Ш. Исследование фазовых переходов в антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке методом Монте-Карло. // *Физика металлов и металловедение* 121 4 (2020) С.346–351.
- A4. Murtazaev K. Sh., Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Magomedov M. A., Murtazaeva A. A. Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions in strong magnetic fields. // *Low Temperature Physics* (2021) Vol 47 P. 515-519.
- A5. Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями в магнитном поле // *Известия РАН. Серия физическая*, 2022. том 86, № 2, с. 182–186.
- A6. K. Sh Murtazaev, M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field. *Physica E* 148 (2023) 115646.

Статьи, индексируемые в РИНЦ:

- A7. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Абуев Я.К., Курбанова Д.Р. Муртазаев К.Ш. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке // Инженерная физика. 2017. Т.8 С. 078-083.
- A8. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Муртазаев К.Ш. Исследование фазовых переходов в трехмерной модели Изинга на треугольной решетке // Вестник Дагестанского Государственного Университета УДК 239.2 2018.

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ:

- A9. Программа для исследования модели Изинга на гранецентрированной кубической решетке репличным методом Монте-Карло / Муртазаев К.Ш. Рамазанов М.К. Мазагаева М.К. // №2021666920, дата регистрации 21.10.2021
- A10. Программа для исследования фазовых переходов в антиферромагнитной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями в магнитном поле / Муртазаев К. Ш., Магомедов М. А., Рамазанов М. К. // № 2022682039. Дата регистрации: 18.11.2022,
- A11. Муртазаев К. Ш., Рамазанов М. К., Магомедов М. А. Программа для расчета термодинамических параметров антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК решетке в магнитном поле. / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023681666
Дата регистрации: 17.10.2023.

Иные публикации, индексируемые в РИНЦ:

- A12. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Абуев Я.К., Курбанова Д.Р. Муртазаев К.Ш. Критическое поведение антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей //Сборник трудов международной конференции

«Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах». г. Махачкала, 2017. С.76-79

- A13. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Абуев Я.К., Курбанова Д.Р. Муртазаев К.Ш. Фазовые переходы в фрустрированной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // Сборник трудов X Научно-практического семинара «Актуальные проблемы физики конденсированных сред», посвященного 110-летию Х.И. Амирханова 6-9 июня 2017 года С. 119-122
- A14. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Курбанова Д.Р. Муртазаев К.Ш. Фазовые переходы в фрустрированной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке // Сборник трудов международной конференции "Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах". Махачкала, 2017. С.61-63.
- A15. Муртазаев А.К. Муртазаев К.Ш. Исследование фазовых переходов и критических явлений в фрустрированной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке. // Тезисы докладов студенческой научно-теоретической конференции по приоритетным направлениям науки и техники Дагестанского государственного университета. Махачкала, 2017 С. 11-12.
- A16. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Муртазаев К.Ш. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке. // Сборник трудов международной конференции "Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах". Махачкала, 2017. С.72-75.
- A17. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Kurbanova D.R., Badiev M.K., Murtazaev K.Sh. Critical phenomena in the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with next-nearest-neighbor interactions. // Book of Abstracts MISM. Moscow, 2017. P.1014.

- A18.A.K. Murtazaev, F.A. Kassan-Ogly, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, D.R. Kurbanova, M.K. Mazagaeva, and K.Sh. Murtazaev. Phase transitions and critical phenomena in the frustrated systems // VII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism». 2019 P. 547.
- A19.D.R. Kurbanova, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, K.Sh. Murtazaev. Phase transitions in heisenberg antiferromagnet on a bcc lattice with competing first and second neighbor interactions // VII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism». 2019. P. 566-567.
- A20.A.K.Муртазаев, М.К.Рамазанов, М.К.Бадиев, Д.Р.Курбанова, К.Ш.Муртазаев. // Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке. Сборник трудов международной конференции "Фазовые переходы, критические и не линейные явления в конденсированных средах". Махачкала, 2019. С. 73-74.
- A21.Д.Р.Курбанова, А.К.Муртазаев, М.К.Рамазанов, М.К.Бадиев, К.Ш.Муртазаев. Фазовые переходы и критические свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке // Сборник трудов международной конференции "Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке". Махачкала, 2019. С. 75-78.
- A22.К.Ш. Муртазаев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, Д.Р. Курбанова. Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке. // Тезисы докладов XXI Всероссийской школы–семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–21) Екатеринбург, 2021. С. 143.
- A23.К.Ш. Муртазаев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Магомедов М.А. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга с магнитным полем. // Сборник трудов международной конференции "Фазовые

переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах". Махачкала, 2021. С. 76-79.

- A24.К.Ш. Муртазаев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Магомедов М.А. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями и магнитным полем. // Сборник трудов международной конференции НМММ-2021. С. 8-53 – 8-55.
- A25.К.Ш. Муртазаев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Магомедов М.А. Влияние магнитного поля на антиферромагнетик с конкурирующими обменными взаимодействиями. // XXIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов - 2022». Москва, 2022. С. 487-488.
- A26.Murtazaev K. Sh., Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Magomedov M. A. Influence of a magnetic field on an antiferromagnet with competing exchange interactions // VIII Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism» Kazan, 2022, P.34-35.
- A27.К.Ш. Муртазаев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Магомедов М.А. Влияние магнитного поля на спиновый антиферромагнетик с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей. // XIX Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» ФИАН, г. Москва 2022г. С. 206-209.
- A28.Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем. // сборник тезисов XX Конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» ФИАН, г. Москва 2023г. С.37-39
- A29.Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Исследования структур основного состояния и термодинамических свойств фрустрированной модели Изинга с магнитным полем. // ТЕЗИСЫ

III Международной конференции «Физика конденсированных состояний» ФКС-2023, посвященной 60-летию ИФТТ РАН, Черногоровка, 2023г. С. 252.

A30. Муртазаев К.Ш., Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. Муртазаева А. А. Исследование термодинамических и магнитных характеристик фрустрированной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке в магнитном поле // Материалы международной научно-практической онлайн-конференции «Междисциплинарные исследования науки, техники и образования (НТО-1)», г. Грозный 2023г. С. 95-98.

A31. Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Исследования антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими взаимодействиями и магнитным полем. // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» г. Махачкала 2023г. С. 34.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Паташинский, А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.А. Покровский // М.: Наука. – 1982. – 380 с.
2. Ма, Ш. Современная теория критических явлений / Ма, Ш. / Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. // Мир. 1980. – 298 с.
3. Landau, D.P. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics / D.P. Landau, K. Binder // Cambridge University Press. – 2000. - 384 p.
4. Kassin-Ogly, F.A. Influence of field on frustrations in low-dimensional magnets / F.A. Kassin-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. et. al. // J. Magn. Magn. Mater. – 2012. -V. 324 -P. 3418–3421.
5. Moran-Lopez, J.L. First-order phase transitions in the Ising square lattice with first and second-neighbor interactions / J.L. Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja, J.M. Sanchez // Physical Review B. – 1993. – V. 48. №. 5. - P. 3519-3522.
6. Moran-Lopez, J.L. Phase transitions in king square antiferromagnets with first and second-neighbour interactions / J.L. Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja, J.M. Sanchez // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1994. – V. 6. – P. 9759-9772.
7. Lopez-Sandoval, F. Cluster variation method and Monte Carlo simulations in Ising square antiferromagnets / E. Lopez-Sandoval, J.L.Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja // Solid State Communications. - 1999. – V. 112. – P. 437-411.
8. Buzano, C. Cluster variation approach to the Ising square lattice with two- and four-spin interactions / C. Buzano, M. Pretti // Physical Review B. – 1997. – V. 56. № 2. - P. 636-644.
9. Rosner, H. High-temperature expansions for the J1-J2 Heisenberg models: Applications to ab initio calculated models for Li₂VOSiO₄ and Li₂VOGeO₄ / H. Rosner, R.R.P. Singh, W.H. Zheng, J. Oitmaa, W.E. Pickett // Physical Review B. – 2003. - V. 67. – P. 014416.

10. Sirker, J. J1-J2 model: First-order phase transition versus deconfinement of spinons / J. Sirker, Z. Weihong, O.P. Sushkov, J.J. Oitmaa // *Physical Review B*. – 2006. – V. 73. – P. 184420.
11. Kamihara, Y. Iron-Based Layered Superconductor La[O_{1-x}F_x]FeAs (x=0.05-0.12) with T_c = 26 K / Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono // *Journal of the American Chemical Society*. – 2008. - V. 130, № 11. – P. 3296-3297.
12. Wen, H.H. Superconductivity at 25 K in hole-doped (La_{1-x}Sr_x)OFeAs / H.H. Wen, G. Mu, L. Fang, H. Yang, X. Zhu // *Europhysics Letters*. – 2008. – V. 82. - P. 17009.
13. Cruz, C. Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered LaO_{1-x}F_xFeAs systems / C. Cruz, Q. Huang, J.W. Lynn, et. al. // *Nature*. – 2008. – V. 453. – P. 899-902.
14. Chen, G.F. Superconductivity at 41 K and Its Competition with Spin-Density-Wave Instability in Layered CeO_{1-x}F_xFeAs / G.F. Chen, Z. Li, D. Wu, G. Li, et. al. // *Physical Review Letters*. – 2008. – V. 100. – P. 247002.
15. Rotter, M. Superconductivity at 38 K in the Iron Arsenide (Ba_{1-x}K_x)Fe₂As₂ / M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt // *Physical Review Letters*. – 2008. – V. 101. – P. 107006.
16. Landau, D.P. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics / D.P. Landau, K. Binder // Cambridge University Press. – 2000. - 384 p.
17. Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory, in: Lacroix C., Mendels, F. Mila (Eds.), - Series in Solid-State Sciences 164, Springer, Berlin, 2011.
18. Sachdev, S. Quantum Phase Transitions / S. Sachdev - Cambridge University Press, 2001.
19. Diep, H.T. Frustrated Spin Systems / H.T. Diep. - World Scientific Publishing, 2004.

20. Diep, H.T. Theoretical methods for understanding advanced magnetic materials: The case of frustrated thin films / H.T. Diep // Journal of Science: Advanced Materials and Devices. – 2016. -V.1 – P. 31-44.
21. Malakis, A. Monte Carlo studies of the square Ising model with next-nearest-neighbor interactions / A. Malakis, P. Kalozoumis, N. Tyraskis // Eur. Phys. J. – 2006. -V.50 -P.63–67.
22. Antoshina, L.G. Magnetostriction of ferrite of the system $\text{CuGaxAlxFe}_{2-2x}\text{O}_4$ ($x=0.5$) with frustrated structure / Antoshina L.G., A.N. Goryaga, E.N. Kukudzhanova // J. Magn. Magn. Mater. -1998. -V.188 -P. 228-232.
23. Antoshina, L.G. On the nature of low-temperature transitions in CuFe_2O_4 ferrite / L.G. Antoshina, A.N. Goryaga, E.A. et. al. // JETP. -1996. -V. 83. P. 1149–1151.
24. Mengxing, Ye. Quantum phase transitions in the Heisenberg J_1 - J_2 triangular antiferromagnet in a magnetic field / Ye. Mengxing, A.V. Chubukov, // Phys. Rev. -2017. -V. 95 -P. 014425.
25. Shun-Qing, Shen. Antiferromagnetic Heisenberg model on an anisotropic triangular lattice in the presence of a magnetic field / Shen Shun-Qing, F.C. Zhang // Phys. Rev. B. -2002. -V.66 -P. 172407.
26. Yamamoto, D. Quantum and Thermal Phase Transitions of the Triangular $\text{SU}(3)$ Heisenberg Model under Magnetic Fields / D.Yamamoto, C.Suzuki, G.Marmorini, et. al. // Phys. Rev. Lett. -2020. -V. 125 -P. 057204.
27. Ramazanov, M.K. Phase transitions in the frustrated Potts model in the magnetic field / M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. -2022. -V. 140. -P. 115226
28. Murtazaev, K. Sh. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field / K. Sh. Murtazaev, M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, et.al. // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. -2023. -V. 148. - P. 115646.

29. Паташинский, А.З. Метод ренормализационной группы в теории фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.А. Покровский // УФН. – 1977. – Т. 121. – С. 55-96.
30. Вильсон К., Когут Д. Ренормализационная группа и ϵ – разложение // Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. В.К. Федянина. – М.: Мир, 1975. – 256 с.
31. Стенли, Г. Фазовые переходы и критические явления / Г. Стенли. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
32. Wilson, K.G. Renormalization group and critical phenomena. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture / K.G. Wilson // Physical Review B. – 1971. – V. 4. №. 9. – P. 3174-3183.
33. Amit, D.J. Field Theory, Renormalization Group and Critical Phenomena. - World Scientific, 1984.
34. Zinn-Justin, J. Quantum field theory and critical phenomena. - Oxford University Press, -2002.
35. Гинзбург, В.Л. О физике и астрофизике. – М.: Наука, 1985. – 400 с.
36. Фишер, М. Физика критического состояния // Пер. с англ. М.Ш. Гитермана. – М.: Мир, 1968. – 221 с.
37. Камилов, И.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев // УФН. – 1999. – Т. 169, №7. – С. 773–795.
38. Corte, I. Exploring neural network training strategies to determine phase transitions in frustrated magnetic models / I. Corte, S. Acevedo, M. Arlego, et. al. // Computational Materials Science. -2021. -V. 198. -P. 110702.
39. Tola, DW, Bekele M. Machine Learning of Nonequilibrium Phase Transition in an Ising Model on Square Lattice / DW. Tola, M. Bekele // Condensed Matter. – 2023. -V. 8. №.3. -P. 83.
40. Tanaka, A., Akio T. Detection of Phase Transition via Convolutional Neural Networks / A. Tanaka, T. Akio // Journal of the Physical Society. – 2017. -V. 86. -P. 063001.

41. Alexandrou, C., The critical temperature of the 2D-Ising model through deep learning autoencoders / C. Alexandrou, A. Athenodorou, C. Chrysostomou, et al. // *Eur. Phys. J.* -2020. -V. 93. -P. 226.
42. Loison, D. Critical behavior of frustrated systems: Monte Carlo simulations versus renormalization group / D. Loison, A.I. Sokolov, B. Delamotte, et. al. // *JETP Letters.* – 2000. – V. 72. №. 6. – P. 487–492.
43. Фаворский, И.А. Свойства малых сферических частиц с дипольным взаимодействием / И.А. Фаворский // *ФТТ.* – 1980. - Т. 22. – С. 2222-2224.
44. Бадиев, М.К. Исследование критических свойств фрустрированных моделей Гейзенберга методами Монте-Карло: дис. канд. физ.-мат. наук / М.К. Бадиев – Махачкала 2012. – 156с.
45. Bogdanov, A. Thermodynamically Stable Magnetic Vortex States in Magnetic Crystals / A. Bogdanov, A. Hubert // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* - 1994. – V. 138. – P. 255.
46. Bogdanov, A. Properties of Isolated Magnetic Vortices / A. Bogdanov, A. Hubert // *Phys. Status Solidi (b).* – 1994. – V. 186. - P. 527.
47. Kang, W. Compact modeling and evaluation of magnetic skyrmion-based racetrack memory / W. Kang, et. al. // *IEEE Transactions on Electron Devices.* – 2017. – V. 64 №. 3. - P. 1060-1068.
48. Bauer, A. Symmetry breaking, slow relaxation dynamics, and topological defects at the field-induced helix reorientation in MnSi / A. Bauer et al. // *Physical Review B.* - 2017. – V. 95. – P. 024429.
49. Moreau-Luchaire, C. Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature / C. Moreau-Luchaire, et al. // *Nature nanotechnology.* – 2016. – V. 11. №. 5. – P. 444-448.
50. Wieser, R. Manipulation of magnetic skyrmions with a scanning tunneling microscope / R. Wieser, R. Shindou, X.C. Xie // *Physical Review B.* – 2017. – V. 95. №. 6. – P. 064417.

51. Wiesendanger, R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics / R. Wiesendanger // Nature Reviews Materials. – 2016. – V. 1. – P. 1604
52. Okamura, Y. Transition to and from the skyrmion lattice phase by electric fields in a magnetoelectric compound / Y. Okamura, F. Kagawa, S. Seki, et. al. // Nature Communications. – 2016. – V. 7. – P. 12669.
53. Доценко, В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком / В.С. Доценко // УФН. – 1995. – Т. 165. № 5. – С. 481–528.
54. Binder, K. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models / K. Binder, E. Luijten // Phys. Reports. – 2001. – V. 344. – P. 179-253.
55. Landau, D.P. Computer simulation studies of critical phenomena / D.P. Landau // Physica A. – 1994. – V. 205. – P. 41 – 64.
56. 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.
57. Holm, C. Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study / C. Holm, W. Janke // Physical Review. – 1993. – V. 48. №. 2. – P. 936-950.
58. Nonomura, Y. New Quantum Monte Carlo Approach to Ground-State Phase Transition in Quantum Spin Systems / Y. Nonomura // Journal of the Physical Society of Japan. – 1998. - V. 67, №. 1. – P. 5-7.
59. Rosana, A. Phase diagram of the Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice / A. Rosana, Anjos dos, J. R. Viana, J. R. Sousa // Physics Letters A. – 2008. – V. 372. – P. 1180–1184.
60. Malakisa, A. Monte Carlo studies of the square Ising model with next-nearest-neighbor interactions / A. Malakisa, P. Kalozoumis, N. Tyraskis // European Physical Journal B. – 2006. – V. 50. – P. 63–67.

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

71. 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 / Mi Bin-Zhou // Solid State Communications. – 2016. – V. 239. – P. 20–26.
72. Bin-Zhou, Mi Magnetism and thermodynamics of the anisotropic frustrated spin-1 Heisenberg antiferromagnet on a body-centered cubic lattice / Mi Bin-Zhou // Solid State Communications. – 2017. – V. 251. – P. 79–87.
73. Richter, J. High-temperature expansion for frustrated magnets: Application to the J_1 - J_2 model on the BCC lattice / J. Richter, P. Mueller, A. Lohmann, et. al. // Physics Procedia Volume. – 2015. – V. 75. – P. 813–820.
74. Smart J.S. Effective field theories of Magnetism. – Saunders, Philadelphia, 1966.
75. Schmidt, R. Spin $-1/2$ J_1 - J_2 model on the body-centered cubic lattice / R. Schmidt, J. Schulenburg, J. Richter // Physical Review B. – 2002. – V. 66. – P. 224406.
76. Majumdar, K. Non-linear spin wave theory results for the frustrated $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet on a body-centered cubic lattice / K. Majumdar, T. Datta // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – V. 21. – P. 406004.
77. Oitmaa, J. Phase diagram of the bcc $S=1/2$ Heisenberg antiferromagnet with first and second neighbor exchange / J. Oitmaa, W. Zheng // Physical Review B. – 2004. – V. 69. – P. 064416.
78. Pantić, M.R. Phase diagram of spin $-1/2$ quantum Heisenberg J_1 – J_2 antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation / M.R. Pantić, V. Kapor Darko, M. Radošević Slobodan, et. al. // Solid State Communications. – 2014. – V. 182. – P. 55–58.
79. Бабаев, А.Б. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, и др. // ЖЭТФ. – 2016. – Т. 149. - С. 357–366.

80. Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния / В.С. Доценко // УФН. – 1993. – 163, № 6. – С. 1–37.
81. Toulouse, G. Theory of the frustration effect in spin glasses / G. Toulouse // Communications Physics. – 1977. – V. 2. №.4. – P.115-119.
82. Binder, K. Spin glass: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions / K. Binder, A.P. Young // Review of modern physics. – 1986. –V. 58. №. 4. – P.801-976.
83. Zhou, C. Wang-Landau algorithm for continuous models and joint density of states / C. Zhou, T.C. Schulthess, S. Torbrügge, D.P. Landau // Physical Review Letters. – 2006. – V. 96. – P. 120201.
84. Parisi, G. A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin glasses / G. Parisi // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1980. – V. 13. №. 4. – P. 115-121.
85. Parisi, G. Order Parameter for Spin-Glasses / G. Parisi // Physical Review Letters. – 1983. V. 50. №. 24. – P. 1946-1948.
86. Moessner, P.R. Magnets with strong geometric frustration / P.R. Moessner // Canadian Journal of Physics. - 2000. -V. 79. -P 1283-1294.
87. Moessner, R. Geometrical frustration / R. Moessner, A. Ramirez // Physics Today. – 2006. -V. 59 – P. 24-29.
88. Ramirez, A.P. Strongly geometrically frustrated magnets / A.P. Ramirez // Annual Review of Materials SCI. - 1994. – V. 24. – P. 453-480.
89. Onsager, L. Crystal statistics: A two- dimensional model with an order-disorder transitions / L. Onsager // Physical Review. – 1944. – V. 65. – P.117-149.
90. Houtappel, R.M.F. Order-disorder in hexagonal latticesPhysica / R.M.F. Houtappel. //-1950. -V. 16. -P. 425.
91. Kano K. Antiferromagnetism. The Kagomé Ising Net. / K. Kano, S. Naya. // Progress of Theoretical Physics. -1953 -V.10. – P. 158.
92. Kassan-Ogly F.A. Frustrations and Phase Transitions in Low-Dimensional Magnetic Systems / F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov. // Solid State Phenomena. – 2011. - V. 427. - P. 168–169

93. Syakuur, Muhammad Abdan. Magnetism on frustrated magnet system of Nd₂B₂O₇ (B = Ru, Ir, Hf, Pb, Mo, and Zr): A systematic literature review / Abdan Syakuur Muhammad, Widayaiswari Utami, Watanabe Isao, et. al. // *Reviews in Physics*. - 2024. - V 12. - P. 100094
94. Jing, Xia. Current-driven skyrmionium in a frustrated magnetic system / Xia Jing, Zhang Xichao, Ezawa Motohiko, et. al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2020. -V. 117. P. 012403.
95. Rosenkranz S. Crystal-field interaction in the pyrochlore magnet Ho₂Ti₂O₇ / S. Rosenkranz, A. P. Ramirez, A. Hayashi et. al. // *J. Appl. Phys.* -2000. -V. 87. -P. 5914–5916
96. Harris, M.J. Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore Ho₂Ti₂O₇ / M.J. Harris, S.T. Bramwell, D.F. McMorrow // *Physical Review Letters*. – 1997. – V. 79. – №. 13. – P. 2554
97. Silverstein, H.J. Liquidlike correlations in single-crystalline Y₂Mo₂O₇: an unconventional spin glass / H.J. Silverstein, K. Fritsch, F. Flicker, // *Phys. Rev. B*. -2014. -V.89 -P. 1-16.
98. Greedan, J.E. Local and average structures of the spin-glass pyrochlore Y₂Mo₂O₇ from neutron diffraction and neutron pair distribution function analysis / J.E. Greedan, D. Gout, A.D. Lozano-Gorrin, et. al. // *Phys. Rev. B*. - 2009. -V. 79 -P. 014427.
99. Van Duijn J. From cooperative paramagnetism to Néel order in Y₂Ru₂O₇: neutron scattering measurements / J. Van Duijn, N. Hur, J.W. Taylor, et. al. // *Phys. Rev. B*. -2008. -V. 77 -P. 020405.
100. MacLaughlin D.E. Muons and frustrated magnetism in NiGa₂S₄ and Pr₂Ir₂O₇ / D.E. MacLaughlin, Y. Nambu, Y. Ohta, et. al. // *J. Phys.* -2010. -V. 225.
101. Machida, Y. Geometrical frustration and spin-liquid behavior of the metallic pyrochlore antiferromagnet Pr₂Ir₂O₇ / Y. Machida, S. Nakatsuji, Y. Maeno et. al. // *J. Magn. Magn. Mater.* -2007. -V. 310. -P. 1328-1330.

102. Nakatsuji, S. Large anomalous Hall effect in a non-collinear antiferromagnet at room temperature / S. Nakatsuji, N. Kiyohara, T. Higo, // *Nature*. -2015. -V.527, -P. 212–215.
103. Petit, S. Observation of magnetic fragmentation in spin ice / S. Petit, E. Lhotel, B. Canals, et. al. // *Nat. Phys.*-2016. -V. 12. -P. 746-750.
104. Anand, V.K. Muon spin relaxation and inelastic neutron scattering investigations of the all-in/all-out antiferromagnet Nd₂Hf₂O₇ / V.K. Anand, D.L. Abernathy, D.T. Adroja et. al. // *Phys. Rev. B*. -2017. -V. 95 -P. 224420.
105. Bertin, A. Nd₂Sn₂O₇: an all-in-all-out pyrochlore magnet with no divergence-free field and anomalously slow paramagnetic spin dynamics / A. Bertin, P.D.D. Reotier, B. Fak et. al. // *Phys. Rev. B*. -2015. -V. 92. -P. 14.
106. Ciomaga M., Structural and magnetic investigations of single-crystalline neodymium zirconate pyrochlore Nd₂Zr₂O₇ / M. Ciomaga, R. Lees, O. Patrenko et. al. // *Phys. Rev. B*. -2015. -V. 91. -P. 174416.
107. Okamoto, Y. Spin-Liquid State in the $S=1/2$ Hyperkagome Antiferromagnet Na₄Ir₃O₈ / Y. Okamoto, M. Nohara, H. Aruga-Katori et.al. // *Phys. Rev. Lett.* -2007. -V.99. -P. 137207.
108. Khuntia, P. Spin Liquid State in the 3D Frustrated Antiferromagnet PbCuTe₂O₆: NMR and Muon Spin Relaxation Studies / P. Khuntia, F. Bert, P. Mendels, et. al. // *Phys. Rev. Lett.* -2016. -V.116. -P. 107203.
109. Koteswararao, B. Magnetic properties and heat capacity of the three-dimensional frustrated $S=1/2$ antiferromagnet PbCuTe₂O₆ / B. Koteswararao, R. Kumar, P. Khuntia, et. al. // *Phys. Rev.* -2014. -V. 90. -P. 035141.
110. Kitagawa, K. A spin–orbital-entangled quantum liquid on a honeycomb lattice / K. Kitagawa, T. Takayama, Y. Matsumoto, et. al. // *Nature*. -2018. -V. 554. -P. 341–345.
111. Mitsutake, A. Generalized-Ensemble Algorithms for Molecular Simulations of Biopolymers / A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto // *Peptide Science*. – 2001. – V. 60. – P. 96. - preprint cond-mat/0012021.

112. Wang, F. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram / F. Wang, D.P. Landau // Physical Review E. – 2001. – V. 64. – P. 056101.
113. Badiev, M.K. Ground-State Structures of the Ising Model on a Layered Triangular Lattice in a Magnetic Field / M.K. Badiev, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, et al //J. Exp. Theor. Phys. -2022. -V.134. -P. 644–649.
114. Murtazaev A.K. Phase transitions in the Ising model on a layered triangular lattice in a magnetic field / A.K. Murtazaev, M.K. Badiev, M.K. Ramazanov, et. al. // Physica A. -2020. -V. 555 -P. 124530.
115. Ramazanov, M.K. Phase Transitions in a Frustrated Four-Vertex Potts Model on a Hexagonal Lattice in a Magnetic Field / M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, et al. //Phys. Metals Metallogr. -2023.-V. 124. -P. 429–436.
116. Murtazaev, K. Sh. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field / K. Sh. Murtazaev, M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, et. al. // Physica E. -2023. -V. 148. -P. 115646.
117. Wang, F. Efficient, Multiple-Range random walk algorithm to calculate the density of states / F. Wang, D.P. Landau // Physical Review Letters. – 2001. – Vol. 86, no. 10. – P.2050-2053.
118. Ramazanov, M.K. Thermodynamic, critical properties and phase transitions of the Ising model on a square lattice with competing interactions / M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov // Solid State Communications. – 2016. – V. 233. - P. 35-40.
119. Муртазаев, А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, и др. // ЖЭТФ. – 2013. -Т. 144. – С. 1239-1245.

120. Бэкстер, Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер / Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. // М.: Мир. – 1985. – 486 с.
121. Сосин, С.С. Новые магнитные состояния в кристаллах / С.С. Сосин, Л.А. Прозорова, А.И. Смирнов // УФН. – 2005. – Т. 175. №1. – С. 92-99.
122. Коршунов, С.Е. Фазовые переходы в двумерных системах с непрерывным вырождением / С.Е. Коршунов // УФН. – 2006. – Т. 176. – С. 233-274.
123. Малеев, С.В. Рассеяние поляризованных нейтронов в магнетиках / С.В. Малеев // УФН. – 2002. – Т. 17. №. 6. – С. 617–646.
124. Tisser, M. Frustrated Heisenberg Magnets: A Nonperturbative Approach. / M. Tisser, B. Delamotte, D. Mouhanna // Physical Review Letters. – 2000. – V. 84. №. 22. – P. 5208-5211.
125. Metropolis, N. Equation of state calculations by fast computing machines / N. Metropolis, W. Rosenbluth, N. Rosenbluth et. al. // The Journal of Chemical Physics. – 1953. – V. 21. – №. 6. – P. 1087-1092.
126. Wood, W.W. Monte-Carlo equation of state of molecules interactions with the Lenard-Jones potential. I: A supercritical isotherm at about twice the critical temperature / W.W. Wood, F.R. Parker // The Journal of Chemical Physics. – 1957. – V. 27. – №. 3. – P. 720-733.
127. Изюмов, Ю.А. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем / Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрыбин // – М.: Наука, 1987. – 264 с.
128. Kawamura, H. Quantum Spin-Liquid Behavior in the Spin-1/2 Random-Bond Heisenberg Antiferromagnet on the Kagome / H. Kawamura, K. Watanabe, T. Shimokawa // Journal of the Physical Society of Japan. – 2014. – V. 83. – P. 103704.
129. Kalyan, M.S. Joint Density of States Calculation Employing Wang–Landau Algorithm / M.S. Kalyan et. al. // Journal of Statistical Physics. — 2016. — V. 163. – №. 1. — P. 197–209.

130. Peczak, P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet / P. Peczak, M. Alan, A.M. Ferrenberg, et. al. // Physical Review B. – 1991. – V. 43. № 7. – P. 6087- 6093.
131. Loison, D. Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians $H = J (\sum_i S_i S_j)^3$ / D. Loison // Physics Letters A. – 1999. – V. 257. – P. 83-87.
132. Sweeny, M. Monte Carlo study of weighted percolation clusters relevant to the Potts models / M. Sweeny // Physical Review – 1983. – V. 27. – P. 4445.
133. Swendsen, R.H., Wang J.Sh. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations / R.H. Swendsen, J.Sh. Wang. // Physical Review Letters. – 1987. – V. 58. №. 2. – P. 86-88.
134. Wolff, U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems / U. Wolff // Physics Letters. – 1989. – V. 62, №. 4. – P. 361-364.
135. Wolff, U. Comparison between cluster Monte Carlo algorithms in the Ising model / U. Wolff // Physics Letters B. – 1989. – V. 228, №. 3. - P. 379-382.
136. Ferrenberg, A.M. Optimized Monte Carlo data analysis / A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen // Physical Review Letters. – 1989. - V. 63, №. 12. – P. 1195-1198.
137. Goodman, J. Multigrid Monte Carlo method for lattice field theories / J. Goodman, A. D. Sokal // Physical Review Letters. – 1986. – V. 56. №. 10. – P. 1015-1018.
138. Creutz, M. Overrelaxation and Monte-Carlo simulation / M. Creutz // Physical Review D. – 1987. – V. 36. №. 2. – P. 515-519.
139. Schmidt, K. E. Using renormalization-group ideas in Monte Carlo sampling / K. E. Schmidt // Physical Review Letters. – 1983. – V. 51. №. 24. – P. 2175-2178.
140. Swendsen, R.H. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses / R.H. Swendsen, J.-S. Wang // Physical Review Letters. – 1986. – V. 57, №. 21. – P. 2607-2609.

141. Hukushima, K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations / K. Hukushima, K. Nemoto // Journal of the Physical Society of Japan. – 1996. – V. 65, №. 6. – P. 1604-1608.
142. Wang, J-S. Low-temperature properties of the $\pm J$ Ising spin glass in two dimensions / J-S. Wang, R.H. Swendsen // Physical Review B. – 1988. – V. 38, №. 7. – P. 4840-4844.
143. Wang, J-S. Monte Carlo and high-temperature-expansion calculations of a spin-glass effective hamiltonian / J-S. Wang, R.H. Swendsen // Physical Review B. – 1988. – V. 38, №. 13. – P. 9086-9092.
144. Hansmann, U.H.E. Monte Carlo simulations in generalized ensemble: Multicanonical algorithm versus simulated tempering / U.H.E. Hansmann, Y. Okamoto // Physical Review E. – 1996. – V. 54, №.11. – P. 5863-5865.
145. Farnell, D. J Ground-state ordering of the J_1 - J_2 model on the simple cubic and body-centered cubic lattices / D. J. Farnell, O. Götze, J. Richter // Physical Review B. – 2016. - V. 93 - P. 235123.
146. Fosdik, L.D. Studies of Monte Carlo method applied to the Ising lattice problem / L.D. Fosdik // Bull. Amer. Phys. Soc. – 1957. – V. 2. №. 4. – P. 239.
147. Landau, D.P. Finite-size behavior of the Ising square lattice / D.P. Landau // Physical Review B. – 1976. – V.13. №.7. – P. 2997 – 3011.
148. Landau, D.P. Finite-size behavior of the simple-cubic Ising lattice / D.P. Landau // Physical Review B. – 1976. – V.14. №.1. – P. 255 – 262.
149. Landau, D.P. Critical behavior of bbc Ising antiferromagnet in a magnetic field lattice / D.P. Landau // Physical Review B. – 1977. – V.16. №. 9. – P. 4164 – 4170.
150. Binder K. Thermodynamics of finite spin systems / K. Binder // Phys. Stat. Sol. B. – 1971. – V.46. №. 2. – P. 567 – 577.
151. Lundow, P.H. The Ising model for the bcc, fcc and diamond lattices: A comparison / P.H. Lundow, K. Markstrom, A. Rosengren // Philosophical Magazine. 2009. – V. 89. №. 22-24. – P. 2009-2042.

152. Bethe, H. Theorie der Metalle. Erster Teil. Eigenwerte und Eigenfunktionen der lineären atomischen Kette / H. Bethe // Z. Physik. – 1931. – V. 71. – P. 205-226.
153. Binder, K. Monte Carlo calculation of the magnetization superparamagnetic particles / K. Binder, H. Rouch, V. Wildpaner // Physics and Chemistry Solids. – 1970. – V. 31. – P. 391 – 397.
154. Фаворский И.А., Воронцов-Вельяминов П.Н., Роциненко О.М., Громова Н.Б. Моделирование магнитных кластеров методом Монте-Карло / И.А. Фаворский, П.Н. Воронцов-Вельяминов, О.М. Роциненко, // – Киев: Препринт ИТФ АН УССР, ИТФ-85-93Р. - 1985. – С. 23.
155. Ferrenberg, A.M. New Monte Carlo technique for studying phase transitions / A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen // Physical Review Letters. – 1988. – V. 61, №. 23. – P. 2635-2638.
156. Ferrenberg, A.M. Optimized Monte Carlo data analysis / A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen // Physical Review Letters. – 1989. - V. 63. №. 12. – P. 1195-1198.
157. Shimokawa, T. Finite-temperature crossover phenomenon in the $S=1/2$ antiferromagnetic Heisenberg model on the kagome lattice / T. Shimokawa, H. Kawamura // J. Phys. Soc. Jpn.-2016. -V.85. -P. 113702.
158. Dagotto, E. Diagram of the Frustrated Spin- 2 Heisenberg Antiferromagnet in Two Dimensions / E. Dagotto, A. Moreo // Physical Review Letters. – 1989. – V. 63. №. 19. – P. 2148-2151.
159. Manousakis, E. The spin – $1/2$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides / E. Manousakis // Review of Modern Physics. - 1991. – V. 63. – С. 1-62.
160. Richter, J. On the violation of Marshall-Peierls sign rule in the frustrated J_1 - J_2 Heisenberg antiferromagnet / J. Richter, N.B. Ivanov, K. Retzlaff // Europhysics Letters. – 1994. – V. 25. – -P. 545-550.

161. Capriotti, L. Spontaneous plaquette dimerization in the J_1 – J_2 Heisenberg model / L. Capriotti, S. Sorella // *Physical Review Letters*. – 2000. - V. 84. №. 14. – P. 3173–3176.
162. Krüger, F. Frustrated Heisenberg antiferromagnets: fluctuation-induced first order vs. deconfined quantum criticality / F. Krüger, S. Scheidl // *Europhysics Letters*. -2006. – V. 74. №. 5. – P. 896-902.
163. Richter, J. The spin $-1/2$ square-lattice J_1 - J_2 model: the spin-gap issue / J. Richter, R. Zinke, D.J.J. Farnell // *European Physical Journal B*. – 2015. – V. 88. – P. 2.
164. Cysne, T.P. Magnetic quantum phase transitions of the two-dimensional antiferromagnetic J_1 - J_2 Heisenberg model / T.P. Cysne, M.B. Silva Neto // *Europhysics Letters*. – 2015. – V. 112. – P. 47002.
165. Farias, C. Spin liquid versus long-range magnetic order in the frustrated body-centered-tetragonal lattice / C. Farias, C. Thomas, C. Pépin, et. al. // *Physical Review B*. – 2016. - V. 94. – P. 134420.
166. Canals, B. Pyrochlore Antiferromagnet: A three-dimensional quantum spin liquid / B. Canals, C. Lacroix // *Physical Review Letters*. – 1998. –V. 80. №. 13. – P. 2933-2936.
167. Koga, A. Frustrated Heisenberg antiferromagnet on the pyrochlore lattice / A. Koga, N. Kawakami // *Physical Review B*. – 2001. – V. 63. – P. 144432.
168. Villain, J. La Structure des substances magnetiques / J. Villain // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1959. – V. 11. – P. 303-309.
169. Diep, H.T. Magnetic transitions in helitagnets / H.T. Diep // *Physical Review B*. – 1989. – V. 39. – P. 397-404.
170. Holt, M. Three-dimensional generalization of the J_1 - J_2 Heisenberg model on a square lattice and role of the interlayer coupling J_c / M. Holt, O.P. Sushkov, D. Stanek, et. al. // *Physical Review B*. – 2011. – V. 83. – P. 144528.
171. Rojas, O. A frustrated three-dimensional antiferromagnet: stacked J_1 - J_2 layers / O. Rojas, C.J. Hamer, J. Oitmaa // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2011. – V. 23. – P. 416001.

172. Fan, Z. Ordered magnetic phase in a frustrated spin – $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnetic stacked square lattice / Z. Fan, Q. Jie // *Physical Review B*. – 2014. – V. 89. – P. 054418.
173. Ferdinand, A.E. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice / A.E. Ferdinand, M.E. Fisher // *Phys. Rev.* – 1969. – V.185. – №. 2 – P.832-846.
174. Fisher, M.E. Scaling theory for finite-size effects in the critical region / M.E. Fisher, M.N. Barber // *Phys. Rev. Lett.* – 1972. – V. 28. – №. 23. – P.1516-1519.
175. Barber, M.N. Finite-size scaling. In: *Phase transitions and critical phenomena*, / M.N. Barber // Academic press. New York. – 1983. –V.8. – P.1.
176. Privman, V. Universal critical amplitudes in finite-size scaling / V. Privman, M.E. Fisher // *Phys. Rev. B*. – 1984. – V.30. – №. 1. – P.322-327.
177. Privman, N. (Editor): *Finite-size scaling and numerical simulation* / N. Privman // Word scientific. Singapore. – 1990.
178. Фишер М. Теория сингулярностей в критической точке // *Устойчивость и фазовые переходы* / М. Фишер / Пер. с англ. С.П. Малышенко, Е.Г. Скроцкой. // М.: Мир. – 1973. –373 с.
179. Mailhot, A. Finite-size scaling of the frustrated model on a hexagonal lattice / A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille // *Physical Review B*. – 1994. – V. 50. – №. 10. – P. 6854-6858.
180. Муртазаев, А.К. Критические свойства трехмерной фрустрированной модели Изинга на кубической решетке / А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов // *ФТТ*. – 2005. - Т. 47, №. 6. – С. 1125-1129.
181. Муртазаев, А.К. Моделирование малых магнитных частиц V₂O₃ / А.К. Муртазаев // *Математическое моделирование*. – 1992. – Т. 4. №. 9. – С. 114-120.
182. Муртазаев, А.К. Моделирование малых магнитных частиц Cr₂O₃ и Fe₂O₃ / А.К. Муртазаев, И. А. Фаворский // *ФНТ*. – 1993. - Т. 19. №. 2. - С. 160-164.

183. Муртазаев, А.К. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей / А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.А. Магомедов // ЖЭТФ – 2001. – Т. 120. №. 6. – С. 1535-1543.
184. Murtazaev, A.K. Critical properties of model of a real magnetic Gd / A.K. Murtazaev, I.K. Kamilov, M.A. Magomedov, et. al. // Physics of Metals and Metallography. – 2001. – V. 92. – P. 110 – 114.
185. Murtazaev, A.K. Quantum Monte Carlo study of low-dimensional magnetic system / A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov // J. Mag. Mag. Mater. -2006. -V. 300. – P. e570 – e573.
186. Lee, J. Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions / J. Lee, J.M. Kosterlitz // Physical Review B. – 1991. – V. 43. – P. 3265-3277.
187. Landau, D.P. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics / D.P. Landau, K. Binder // Cambridge University Press. – 2000. - 384 p.
188. Murtazaev, A.K. Phase transitions in the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with second nearest neighbor interactions / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, F.A. Kassin-Ogly, et. al. // JETP. -2015. -V. 147. -P. 127.
189. Murtazaev, A.K. Phase diagrams and ground-state structures of the antiferromagnetic materials on a body-centered cubic lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova, et. al. // Mater. Lett.-2019. -V. 236. -P. 669.
190. Murtazaev A.K. Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M. K. Badiev // Physica B. -2015. –V. 476. –P. 1.
191. Ramazanov, M.K. Phase diagrams and ground-state structures of the Potts model on a triangular lattice / M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov // Physica A. – 2019. – V. 521. – P. 543-550.

192. Murtazaev, A.K. A study of the critical properties of the Ising model on body-centered cubic lattice taking into account the interaction of next behind nearest neighbors / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova et. al. // *Physics of the Solid State*. -2017. –V. 59. –P. 1103-1109.
193. Kassan-Ogly, F.A. Frustrations and Ordering in Magnetic Systems of Various Dimensions / F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin // *Physics of the Solid State*. - 2018. –V. 60. –P. 1090-1097.
194. Proshkin, A.I. Exact solution of 1D ising model on linear chain with arbitrary spin / A.I. Proshkin, F.A. Kassan-Ogly // *Mater. Sci. Forum*. -2016. –V. 845. – P. 93-96.
195. Муртазаев, А.К. Исследование критических свойств модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих за ближайшими соседями / А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Я.К. Абуев и др. // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, В. 6. – С. 1082-1088.
196. Shell, M.S. Generalization of the Wang-Landau method for off-lattice simulations / M.S. Shell, P.G. Debenedetti, A.Z. Panagiotopoulos // *Physical Review E*. - 2002. - V. 66. №. 5. – P. 56703.
197. Binder, K. Finite-size effects at critical points with anisotropic correlations: phenomenological scaling theory and Monte Carlo simulations / K. Binder, J.Sh. Wang // *Journal of Statistical Physics*. – 1989. – V. 55. – P. 87-126.
198. Binder, K., *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* / K. Binder, D. W. Heermann // - Springer_Verlag. 1988; - M.: Nauka. 1995.
199. Velgakis M.J. Fluctuation-induced, first-order transition in a bcc Ising model with competing interactions / M.J. Velgakis, M. Ferer // *Physical Review B*. – 1983. – V. 27. №. 1. – P.401-412.
200. Khuntia P. Novel magnetism and spin dynamics of strongly correlated electron systems: Microscopic insights / P. Khuntia. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2019. – V. 489. – P. 165435.

201. Stryjewski, E. Metamagnetism / E. Stryjewski, N. Giordano // *Advances in Physics*. -1977. –V. 26. №. 5 -P. 487–650.
202. Jacobs, I. Metamagnetic Phase Transitions and Hysteresis in FeCl_2 / I. S. Jacobs, , P. E. Lawrence, // *Physical Review*. -1967. –V. 164. №.2. –P. 866–878.
203. Griffin, J. A. Optical investigation of the metamagnetic properties of FeCl_2 . / J. A. Griffin, S. E. Schnatterly, Y. Farge // *Physical Review B*. -1960. –V. 10. №. 5. –P. 1960–1966.
204. Schmidt, V. A. Metamagnetism of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. / V. A. Schmidt, S.A. Friedberg, // *Physical Review B*. -1970. –V. 1. №. 5. –P. 2250–2256.
205. Lander, G. H. Magnetic and lattice properties of CeBi . / G. H. Lander, M. H. Mueller, O. Vogt // *AIP Conference Proceedings*. -1975. –V.24 –P. 430-431.
206. Bartholin, H. Magnetic Properties of CeBi / H. Bartholin, D. Florence, W. Tcheng-Si, et. al. // *Physica Status Solidi (a)*. -1975. –V. 24. №. 2. –P. 631–636.
207. Busch, G. Magnetic anisotropy of CeSb single crystals / G. Busch, O. Vogt // *Physics Letters A*. -1967. –V. 25. №. 6. –P. 449–450.
208. Murtazaev, A.K. Phase Transitions and the Critical Properties of the Heisenberg Model on a Body-Centered Cubic Lattice / A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova, et. al. // *Phys. Solid State* -2019. –V. 61. –P. 1107–1112.
209. Kazuaki, M. Dynamical scaling analysis of symmetry breaking for the antiferromagnetic triangular Heisenberg model in a uniform magnetic field / M. Kazuaki and O. Yukiyasu // *Phys. Rev. B*. – 2020. – V. 101. – P. 184427.
210. Murtazaev, Akai. Phase transitions in the Heisenberg model on a layered triangular lattice in a magnetic field / Akai Murtazaev, Magomedzagir Badiev, Magomedshaykh Ramazanov, Magomed Magomedov // *Phase Transitions*. - 2021. –V. 94. –P. 394-403.
211. Муртазаев, А. К. Фазовые переходы и критические свойства антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной

- кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов // ЖЭТФ. – 2019. – Т. 156. №. 5. – С. 980-988.
212. Kawamura, H. Monte Carlo Study of Chiral Criticality –XY and Heisenberg Stacked-Triangular Antiferromagnets / H. Kawamura // Journal of the Physical Society of Japan. – 1992. – V. 61. – № 4. – P. 1299-1325.
213. H. Kawamura, S. Miyashita. Magnetic Properties of Ising-Like Heisenberg Antiferromagnets on the Triangular Lattice / H. Kawamura, S. Miyashita // J. Phys. Soc. Jpn. -1985. –V. 54. –P. 4530.
214. Gvozdikova M. Magnetic phase diagrams of classical triangular and kagome antiferromagnets / M. Gvozdikova, P. Melchy, M. Zhitomirsky // J. Phys.: Condens. Matter. -2011. –V. 23. –P. 164209.
215. Kawamura H. Magnetic phase diagrams of classical triangular and kagome antiferromagnets / H. Kawamura, M. Kikuchi // Phys. Rev. B. -1993. –V. 47. – P. 1134.
216. Chubukov, A.V. Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field / A.V. Chubukov, D.I. Golosov. // J. Phys.: Condens. Matter. -1991. –V. 3. –P. 69.
217. Kawamura, H. Z₂-Vortex Ordering of the Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet / H. Kawamura, A. Yamamoto, T. Okubo. // J. Phys. Soc. Jpn. -2010. –V.79. –P. 023701.
218. Sushkov, O.P. Quantum phase transitions in the twodimensional J₁-J₂ model / O.P. Sushkov, J. Oitmaa, Z. Weihong // Physical Review B. - 2001. – V. 63. – P. 104420.
219. Murtazaev, A.K. Phase diagram of the antiferromagnetic Heisenberg model on a bcc lattice with competing first and second neighbor interactions / A.K. Murtazaev, D.R. Kurbanova, M.K. Ramazanov // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. -2020.-V. 545. –P. 123548.

СПИСОК СОКРАЩЕННЫХ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

ФП – фазовый переход (фазовые переходы)

МП – магнитное поле (магнитные поля)

КИ - критические индексы

МК - Монте-Карло

ОЦК - объемно-центрированная кубическая решетка