05,10,11

Фрустрации и упорядочение в магнитных системах различной размерности

© Ф.А. Кассан-Оглы[1], А.И. Прошкин[1,2,¶]

[1] Институт физики металлов УрО РАН им. М.Н. Михеева,
Екатеринбург, Россия
[2] Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия
¶ E-mail: proshkin_ai@imp.uran.ru

На основании точных и численных расчетов в рамках моделей Изинга и Поттса на решетках различных типов и размерностей (одномерной, квадратной, треугольной, гексагональной, кагоме, простой кубической и объемноцентрированной) исследованы возникающие магнитные упорядочения, фазовые переходы и фрустрации при учете обменных взаимодействий между магнитными моментами на ближайших и вторых соседних узлах, а также внешнего магнитного поля. Установлены причины возникновения фрустраций и определены существенные особенности поведения фрустрированных систем, отличающие их от систем нефрустрированных.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема „Квант“ № 01201463332) при финансовой поддержке УрО РАН (проект № 15-8-2-10).

DOI: 10.21883/FTT.2018.06.45980.04M

1. Введение

За последние 15 лет к проблемам фрустраций в магнитных системах проявляется все возрастающий интерес, о чем свидетельствует бурный рост числа публикаций (см., например, [1]). Экспериментальный и теоретический материал по фрустрированным магнитным системам, как в низкоразмерных объектах, так и в реальных $3D$-кристаллах и некристаллических веществах, весьма богат и изобилует новыми явлениями и необычными свойствами. Однако надлежащая интерпретация и теоретическое объяснение множества экспериментальных фактов и новых эффектов в настоящее время отсутствует, многие свойства фрустрированных систем еще недостаточно поняты. Численные расчеты разнообразными методами компьютерного моделирования фрустрированных систем часто приводят к ложным результатам из-за отсутствия надежных критериев истинности.

Главной задачей данного исследования являлось установление причин возникновения фрустраций в системе и нахождение конкретных значений физических параметров, определяющих упорядочена ли система или находится во фрустрированном состоянии. Такими параметрами служат знаки и величины обменных взаимодействий, а также направление и величина внешнего магнитного поля. Топология решетки также оказывает сильное влияние на упорядоченность либо фрустрированность системы при одних и тех же физических параметрах.

Другая важная задача исследования — установление существенных особенностей поведения фрустрированных систем, отличающих их от систем нефрустрированных.

В изинговской, 3-вершинной и стандартной 4-вершинной моделях Поттса исследовались магнитное упорядочение, фазовые переходы и фрустрации на $1D$-, $2D$- и $3D$-решетках: цепочке, квадратной, треугольной, гексагональной, кагоме, простой кубической и объемноцентрированной кубической при учете обменных взаимодействий между магнитными моментами на ближайших и вторых соседних узлах, а также внешнего магнитного поля.

Для решения задач рассчитывались, в основном, энтропия и теплоемкость, используя аналитические формулы точных решений для максимального собственного значения трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье. В отсутствие точных решений проводилось компьютерное моделирование в разных вариантах Монте-Карло и алгоритма Ванга–Ландау. С помощью расчетов энтропии, теплоемкости и намагниченности определялись точки фрустраций, фрустрационные поля и целые линии фрустраций.

Термин „фрустрация“ был привнесен в теорию магнетизма Тулузом в 1977 г. [2]. Фрустрации в физике твердого тела формулируются обычно как явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствие конкурирующих взаимодействий. Это приводит к сильному вырождению основного состояния системы (бесконечное число конфигураций, имеющих одинаковую наинизшую внутреннюю энергию) с ненулевой энтропией при нулевой температуре.

2. Модели и основные формулы

Все рассматриваемые модели на всех исследуемых решетках описываются гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2}\sum_{i,\Delta}(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+\Delta}) - \frac{J'}{2}\sum_{i,\Delta'}(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+\Delta'}) - \sum_i(\mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_i), \quad (1)$$

где J и J' — обменные взаимодействия между спинами на соседних и следующих узлах, h — внешнее магнит-

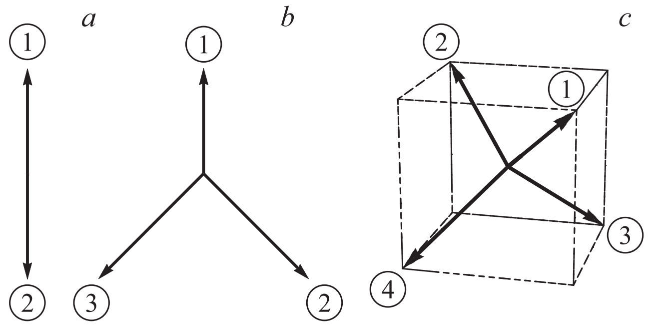

Рис. 1. *a* — модель Изинга, *b* —3-х вершинная модель Поттса, *c* — 4-х вершинная стандартная модель Поттса.

ное поле, суммирование выполняется по всем i узлам решетки, по ближайшим соседям Δ и вторым соседям Δ' узла i. Векторы единичной длины $\mathbf{s}$ принимают два, три или четыре разрешенных значения соответственно в модели Изинга, 3- и 4-вершинной моделях Поттса (рис. 1). При наличии точных решений энтропия, теплоемкость и намагниченность выражаются только через максимальное собственное значение трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье λ с помощью формул

$$S = \ln(\lambda) + \frac{T}{\lambda}\frac{\partial\lambda}{\partial T}, \quad C = T\frac{\partial S}{\partial T}, \quad M = \frac{T}{\lambda}\frac{\partial\lambda}{\partial h}. \qquad (2)$$

При отсутствии точных решений проводились численные расчеты модифицированными методами Монте-Карло, преимущественно в алгоритме Ванга–Ландау [3].

3. Упорядочение и фрустрации на одномерной решетке

На одномерной решетке в модели Изинга с учетом только взаимодействия между ближайшими соседями фрустраций не существует, имеет место фазовый переход при $T \to 0$: в ферромагнитной модели — с сохранением периода трансляций; в антиферромагнитной — с удвоением периода трансляций. В антиферромагнитных моделях Поттса, наоборот, при учете только взаимодействия ближайших соседей фрустрации возникают, а фазовый переход при $T \to 0$ невозможен.

Учет взаимодействия между вторыми соседями порождает совершенно новые явления. В модели Изинга при учете двух типов конкурирующих взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями: ферро-антиферро ($J > 0, J' < 0$) и антиферро-антиферро ($J < 0, J' < 0$) возникают фрустрации в точках $r = -0.5$ ($r = J'/J$) и $r = 0.5$ соответственно, причем в обоих случаях энтропия при нулевой температуре равна логарифму золотого сечения $S_{T=0} = \ln[(1+\sqrt{5})/2] \sim 0.481$.

В 3-вершинной антиферромагнитной модели Поттса любое, даже сколь угодно малое ферромагнитное взаимодействие вторых соседей уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с удвоением периода трансляций; любое, даже сколь угодно малое, антиферромагнитное взаимодействие вторых соседей уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с утроением периода трансляций. При учете магнитного поля в 3-вершинной антиферромагнитной модели Поттса (направление поля совпадает с одним из направлений магнитных моментов) возникают фрустрации при $h_{fr} = -2J$, в котором нультемпературная энтропия равна $\ln(2)$ [4].

В 4-вершинной стандартной антиферромагнитной модели Поттса любое, даже сколь угодно малое, положительное взаимодействие вторых соседей уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с удвоением периода трансляций. В отличие от 3-вершинной модели антиферромагнитное взаимодействие вторых соседей не может уничтожить фрустрации и породить фазовый переход. Основное состояние оказывается вырожденным с отличной от нуля энтропией при $T \to 0$, равной $\ln(2)$. Учет дополнительного антиферромагнитного взаимодействия между третьими соседями подавляет фрустрации [5].

В 3-вершинной ферромагнитной модели Поттса возникает полубесконечная линия фрустраций (фрустрационный параметр $r = J'/J$), причем нультемпературная энтропия в точке фрустрации ($r = -0.5$) равна $\ln(2)$, а при $r < -0.5$: $\ln(2)/2$.

В 4-вершинной ферромагнитной стандартной модели Поттса также возникает полубесконечная линия фрустраций (фрустрационный параметр $r = J'/J$), причем нультемпературная энтропия в точке фрустрации ($r = -0.5$) равна $\ln[(1+\sqrt{13})/2]$, а при $r < -0.5$: равна $\ln(3)/2$.

Таким образом в 3- и 4-вершинных ферромагнитных моделях фрустраций не существует, а существует фазовый переход при $T \to 0$. Однако сильное взаимодействие вторых соседей $|J'/J| > 0.5$ порождает фрустрации и подавляет нультемпературный фазовый переход.

Мы исследовали также квантовую антиферромагнитную модель Изинга с произвольным значением спина и учетом внешнего магнитного поля на линейной решетке [6]. Получены общие аналитические выражения для фрустрационного поля, нультемпературных значений намагниченности и энтропии во фрустрационном поле, а также нультемпературной энтропии в точках фрустраций при учете конкурирующих взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями.

Одномерная антиферромагнитная модель Изинга на цепочке спинов с учетом взаимодействий между ближайшими соседями в магнитном поле оказывается фрустрированной в магнитном поле $H_{fr} = 2s|J|$. При этом точные выражения для намагниченности и энтропии во фрустрирующем поле при $T \to 0$ как функции спина s имеют вид

$$M_{fr} = \left(\frac{2s-1}{4}\right) + \left(\frac{2s+1}{4}\right)\frac{1}{\sqrt{1+8s}}, \qquad (3)$$

$$S_{fr} = \ln\left(\frac{1+\sqrt{1+8s}}{2}\right). \qquad (4)$$

В случае учета взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями при отсутствии магнитного поля модель оказывается фрустрированной в точке $|r| = 0.5$, где r — отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими. В обоих случаях конкурирующих взаимодействий (антиферро-антиферро и ферро-антиферро) выражение для нультемпературной энтропии в точке фрустрации имеет вид

$$S_{fr} = \ln \frac{1}{3}\left[1 + \left(27s - 8 + 3\sqrt{3}\sqrt{27s^3 - 16s}\right)^{1/3} + \left(27s - 8 - 3\sqrt{3}\sqrt{27s^3 - 16s}\right)^{1/3}\right]. \qquad (5)$$

4. Типы фазовых диаграмм

Многочисленные расчеты и анализ имеющихся в литературе результатов позволяет сделать вывод о существовании четырех типов фазовых диаграмм (зависимостей температур фазовых переходов от фрустрационных параметров).

На рис. 2 представлена фазовая диаграмма для наиболее изученного случая — модели Изинга на квадратной решетке с конкурирующими антиферромагнитными взаимодействиями между ближайшими $J < 0$ и вторыми соседями $J' < 0$ (см., например, [7]). Из расчетов следует, что существует единственная точка фрустраций $r = 0.5$ ($r = J'/J$), причем нультемпературная энтропия $S_{T \to 0}$ равна нулю во всем диапазоне r, в том числе и во фрустрационной точке, а температура фазового перехода во фрустрационной точке равна нулю. Такое поведение наблюдается также в модели Изинга на квадратной и гексагональной решетках, причем фрустрационным параметром r, изменяющимся от ∞ до $+\infty$, является отношение обменных взаимодействий между ближайшими соседями J_2/J_1 по двум разным направлениям, а фрустрационные точки в том и в другом случае равны нулю. Такой тип поведения системы довольно широко распространен в литературе и получил не совсем удачное название квантового фазового перехода (QPT).

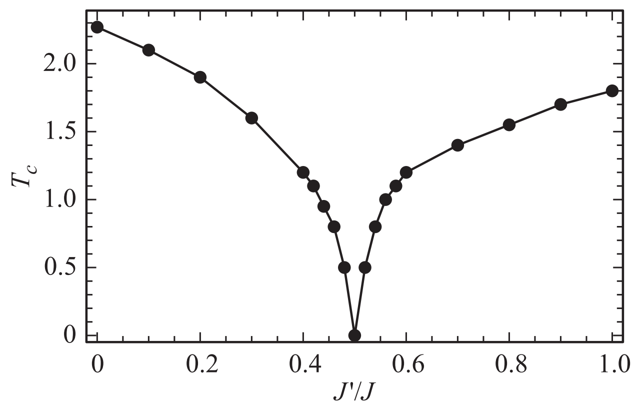

Рис. 2. Температура фазового перехода как функция J'/J в модели Изинга на квадратной решетке.

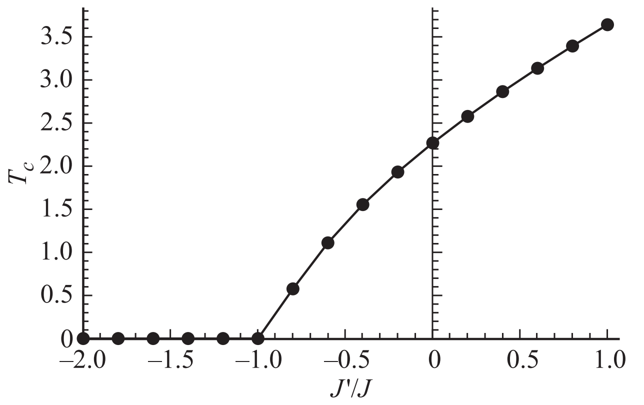

Рис. 3. Температура фазового перехода как функция $r = J_2/J_1$ в модели Изинга на треугольной решетке.

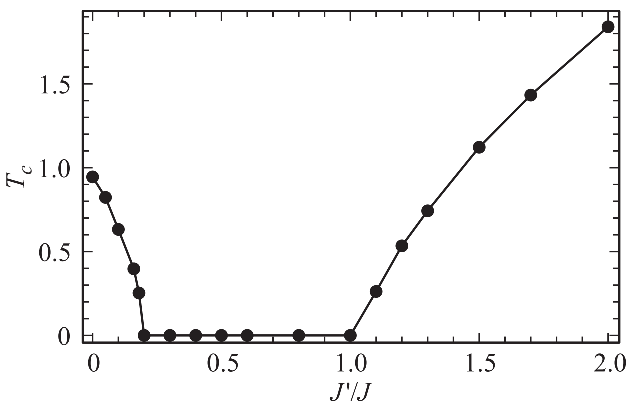

Рис. 4. Температура фазового перехода как функция J'/J в 3-вершинной модели Поттса на треугольной решетке [11].

Второй тип фазовой диаграммы представлен на рис. 3 на примере модели Изинга на треугольной решетке и решетке кагоме. Фрустрационным параметром r, изменяющимся от $-\infty$ до $+\infty$, здесь также является отношение обменных взаимодействий между ближайшими соседями J_2/J_1 по двум разным направлениям. Однако существует одна особая фрустрационная точка $r = -1$, а также целый диапазон фрустраций на полубесконечной линии. Нультемпературная энтропия $S_{T \to 0}$ во фрустрационной точке не равна нулю (0.323 на треугольной решетке [8], 0.501 на решетке кагоме [9]). Во всем остальном диапазоне фрустрационного параметра $r \in (-1, +\infty)$ нультемпературная энтропия равна нулю.

Этот же тип фазовой диаграммы наблюдается в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке во внешнем поле при учете только взаимодействия между ближайшими соседями. Нультемпературная энтропия $S_{T=0} \sim 0.408$ во фрустрационном поле $h_{fr} = 4$ [10].

На рис. 4 представлен третий, совершенно новый тип фазовой диаграммы, полученной в работе [11]. Расчеты проводились в 3-вершинной модели Поттса

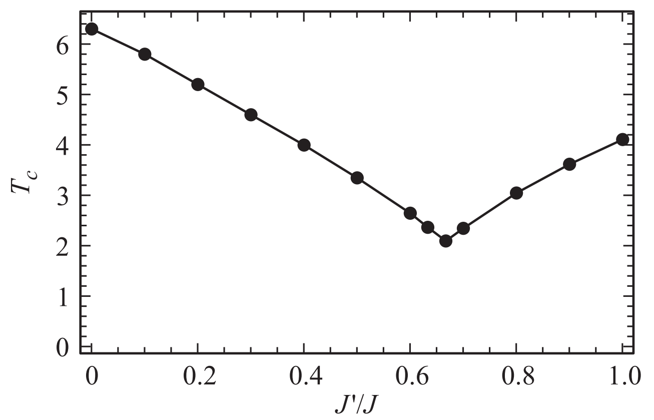

Рис. 5. Температура фазового перехода как функция J'/J в модели Изинга на ОЦК-решетке [12].

на треугольной решетке в двух вариантах конкурирующих обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями: 1) антиферромагнитное J_1 — антиферромагнитное J_2 и 2) ферромагнитное J_1 — антиферромагнитное J_2. В обоих случаях наблюдается не одна фрустрационная точка, а конечный диапазон фрустрационного параметра r (от 0.2 до 1.0 в первом варианте и от -1.0 до -0.5 во втором), причем внутри того и другого диапазона нультемпературная энтропия $S_{T=0} \sim 0.301$.

Пример четвертого типа фазовой диаграммы представлен на рис. 5 на примере ОЦК-решетки в модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями: антиферромагнитном J_1 и антиферромагнитном J_2 [12]. Фрустрирующая точка одна и равна $r = 2/3$. Аналогичный вид имеет и диаграмма во втором варианте конкурирующих обменных взаимодействий: ферромагнитном J_1 и антиферромагнитном J_2 с точкой фрустрации, равной $r = -2/3$. Этот же тип фазовой диаграммы наблюдается на простой кубической решетке в обоих вариантах конкурирующих взаимодействий с точкой фрустрации $|r| = 1/4$.

5. Расщепление теплоемкости

Мы обнаружили особое явление, присущее всем фрустрационным моделям на любых решетках: в непосредственной близости от точки фрустраций или фрустрационного поля теплоемкость расщепляется на острый лямбдаобразный онзагеровский пик и плавный куполообразный максимум. Острый пик, определяющий температуру фазового перехода, при приближении к точке фрустраций или фрустрационному полю стремится к нулю и исчезает точно в точке фрустраций или фрустрационном поле, а при удалении от точки фрустраций или фрустрационного поля, наоборот, исчезает куполообразный максимум.

Рис. 6, рассчитанный с помощью точного решения Онзагера [13], демонстрирует это явление. На рис. 6, a изображено поведение точки фазового перехода (сплошная линия) и положение куполообразного максимума (точки), как функция $r = J_y/J_x$. На рис. 6, b приведен расчет теплоемкости при $r = 0.01$. Такое же расщепление теплоемкости обнаруживается при расчетах во всех фрустрированных моделях и решетках, в частности, на антиферромагнитной треугольной решетке и решетке кагоме.

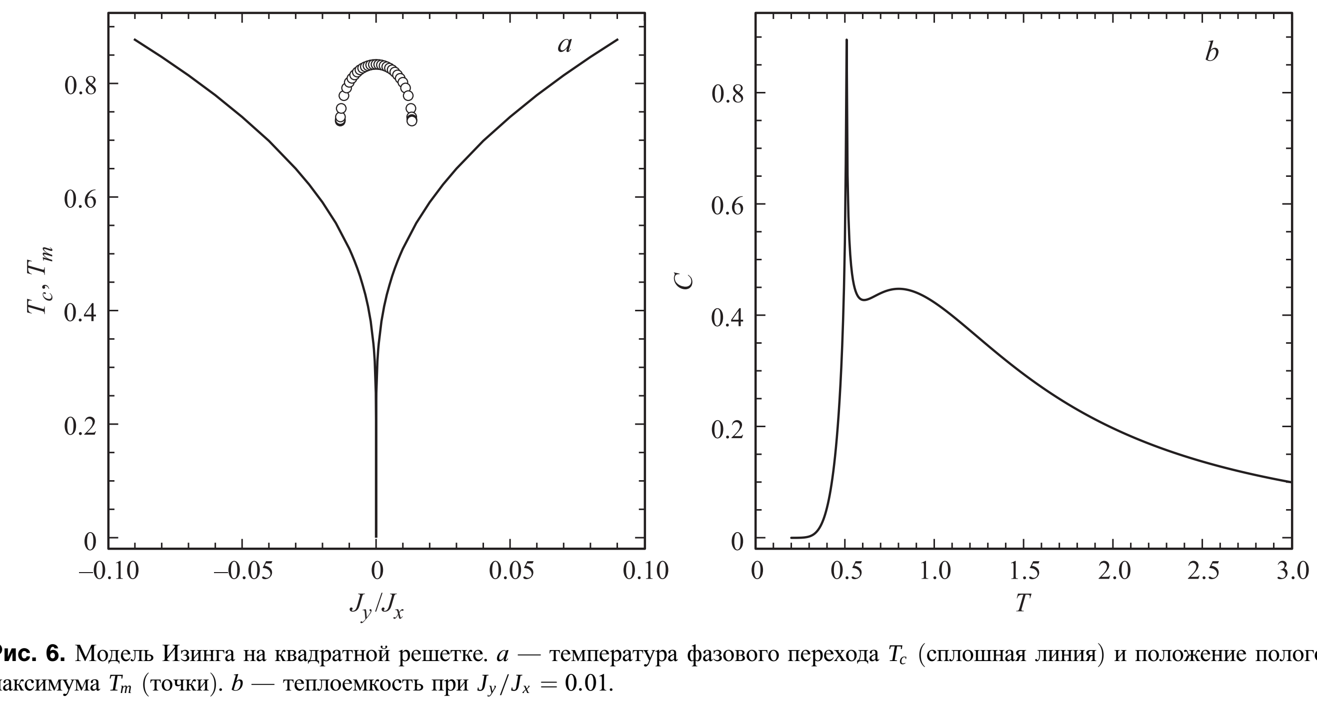

Рис. 6. Модель Изинга на квадратной решетке. a — температура фазового перехода T_c (сплошная линия) и положение пологого максимума T_m (точки). b — теплоемкость при $J_y/J_x = 0.01$.

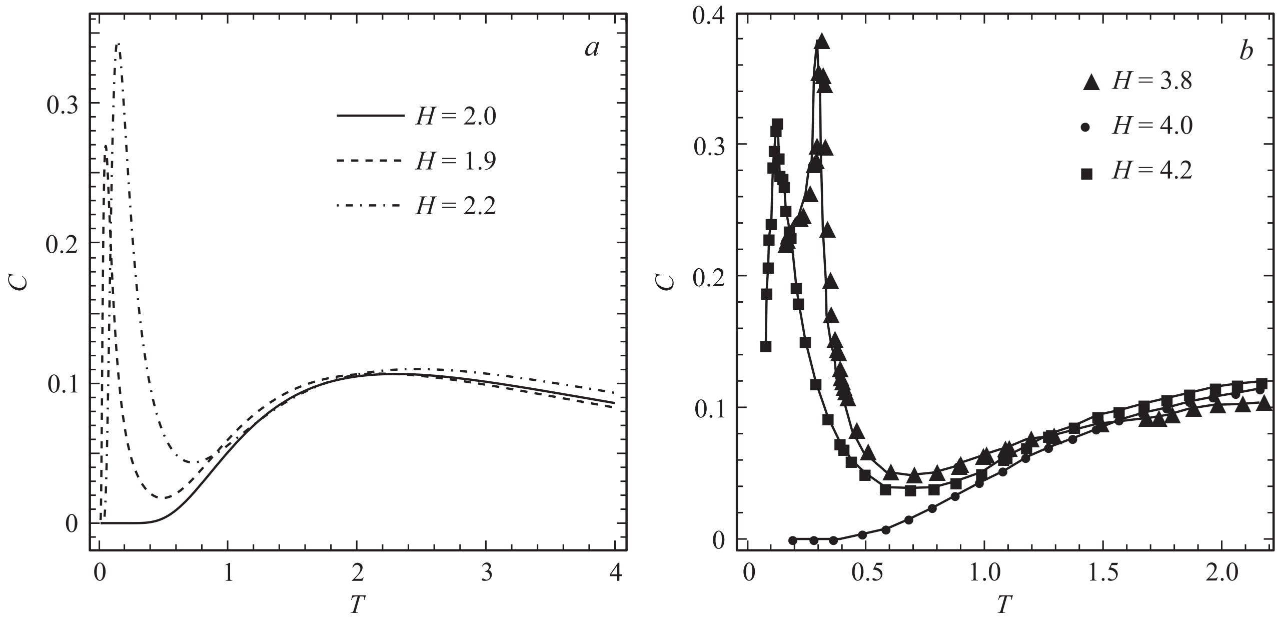

Рис. 7. Теплоемкость в модели Изинга на линейной (a) и квадратной решетках (b).

Рис. 7 демонстрирует, в качестве примера, расщепление теплоемкости на линейной цепочке и квадратной решетке в антиферромагнитной модели Изинга вблизи фрустрационного поля.

Такое расщепление магнитного вклада в теплоемкость и сдвиги острого пика и куполообразного максимума наблюдаются и в реальных 3D-кристаллах, в которых магнитные атомы занимают ГЦК-решетку, например, в монохалькогениде TmTe [14] и в монопниктиде ErBi [15]. Авторы обеих работ отмечают, что им не удалось описать расщепление теплоемкости теоретически.

6. Частичное упорядочение

Во фрустрированных системах наблюдается еще одно явление, тесно связанное с общими свойствами энтропии — это частичное упорядочение, или упорядочение с понижением размерности. В рассматриваемых моделях нультемпературная или остаточная энтропия (при $T \to 0$), приходящаяся на один узел решетки, равна $\ln(n)/N$, где N — число узлов решетки, а n — число конфигураций с наинизшей внутренней энергией, то есть таких, которые выживают при $T \to 0$. Если n конечно, то в термодинамическом пределе $(N \to 0)$ энтропия равна нулю, а в системе наблюдается упорядочение. Если же n бесконечно и порядка q^N (q — число разрешенных состояний на узле) то нультемпературная энтропия не равна нулю, и упорядочения нет даже при $T \to 0$, что соответствует фрустрациям.

На рис. 8, демонстрирующем пример частичного упорядочения на треугольной решетке в модели Изинга с антиферромагнитными взаимодействиями по трем направлениям (причем $J_3 < J_1 = J_2$), представлена одна из бесконечного множества конфигураций, имеющих наинизшую энергию при $T = 0$. Видно, что конфигурация представляет структуру, составленную из цепочек, упорядоченных антиферромагнитно в горизонтальном направлении, и неупорядоченных по другим направлениям.

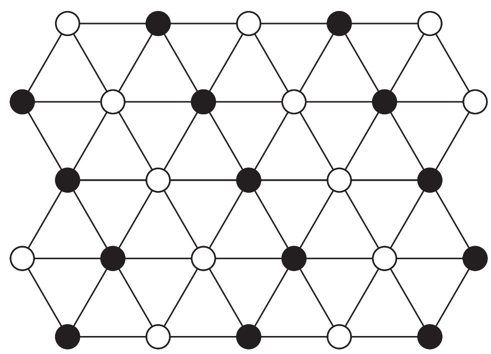

Рис. 8. Частичное упорядочение на треугольной решетке.

Рис. 9 демонстрирует одновременно два примера частичного упорядочения на квадратной решетке в модели Изинга. Первый соответствует учету взаимодействия только между ближайшими соседями, причем $J_y > 0$, $J_x = 0$. Второй пример соответствует учету взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, причем оба взаимодействия J_1 и J_2 антиферромагнитные, а фрустрирующий параметр $r = J_2/J_1 = 0.5$. Нультемпературная энтропия, приходящаяся на один узел решетки, в первом случае равна $\ln(2)/N_y$ и соответственно равна нулю. Во втором случае, нультемпературная энтропия другая. Она равна $\ln[(1 + \sqrt{5})/2]/N_x$ и в термодинамическом пределе также стремится к нулю. Совершенно

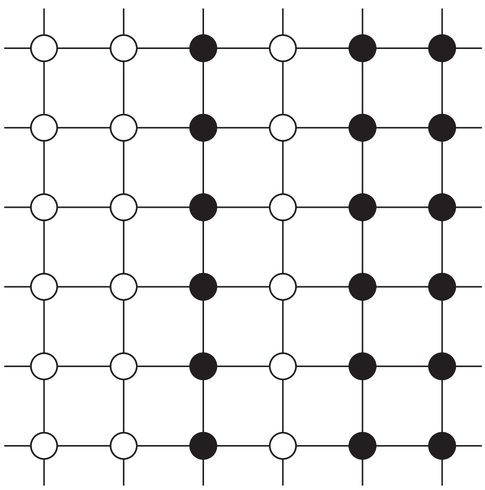

Рис. 9. Частичное упорядочение на квадратной решетке.

очевидно, что на всех $2D$-решетках в любых моделях частичное упорядочение сопровождается одним типом понижения размерности, а именно, с двумерного на одномерное. В трехмерном случае возможны три типа понижения размерности. Первый, с $3D$ на $2D$, который в точке фрустраций должен сопровождаться ненулевым значением температуры перехода. Второй, с $3D$ на $1D$ с нулевым значением температуры перехода в точке фрустраций. Третий, двухстадийное понижение размерности, сначала с $3D$ на $2D$ с ненулевым значением температуры перехода, а затем с $2D$ на $1D$ с нулевым значением температуры перехода. Поэтому определение и поиски частичного упорядочения на $3D$-решетках представляет собой довольно сложную задачу.

7. Конкурирующие и неконкурирующие взаимодействия

В обширной литературе по компьютерному моделированию обычно считается, что конкурирующие взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями могут быть в двух вариантах: ферро-антиферро ($J > 0$ и $J' < 0$), либо антиферро-антиферро ($J < 0$ и $J' < 0$). Это справедливо для модели Изинга на решетках всех размерностей, для 3-вершинной модели Поттса на треугольной решетке, для 4-вершинной стандартной модели Поттса на ГЦК-решетке и многих других. Однако это не всегда так. Совокупное влияние топологии решетки и применяемой модели может приводить к противоположному результату.

Рассмотрим, например, 3-вершинную модель Поттса с антиферромагнитными обменными взаимодействия между ближайшими J и вторыми соседями J' на треугольной решетке и решетке кагоме. В этом случае оба взаимодействия (в отличие от модели Изинга) требуют не антипараллельного расположения спинов в любой паре, а расположения спинов под углами 120, либо 240°. Будем считать, что взаимодействие между ближайшими соседями много больше, чем между вторыми соседями. Тогда мы обязаны расположить спины на всех ближайших соседях под углами 120, либо 240°. На рис. 10 (треугольная) и рис. 11 (кагоме) это требование выполнено на обеих решетках. Однако на треугольной решетке все пары вторых соседей расположены параллельно, что противоречит требованию обменного взаимодействия J', т. е. возникла конкуренция. В противоположность этому, на решетке кагоме все пары вторых соседей уже расположены под углами 120° либо 240°, что отвечает требованию обменного взаимодействия J'. Таким образом, на решетке кагоме антиферромагнитные взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями являются неконкурирующими.

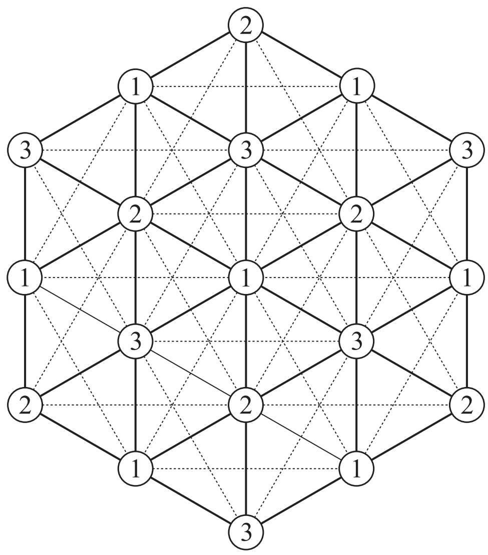

Рис. 10. 3-вершинная модель Поттса на треугольной решетке.

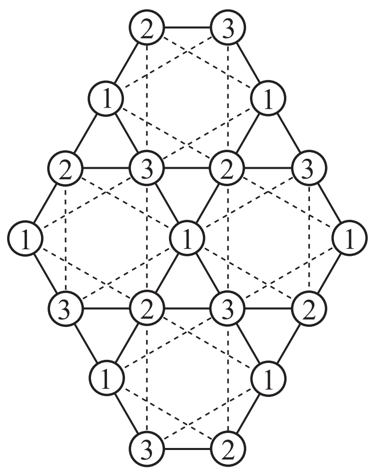

Рис. 11. 3-вершинная модель Поттса на решетке кагоме.

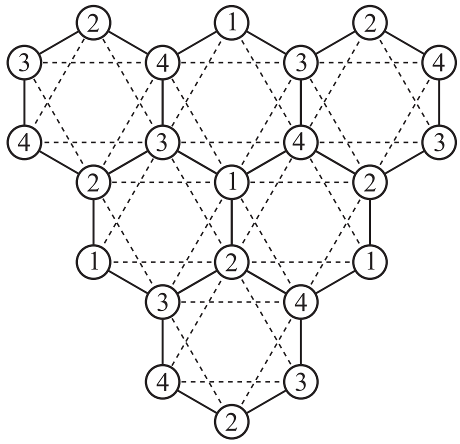

Рис. 12. 4-вершинная стандартная модель Поттса на гексагональной решетке.

На рис. 12 приведен еще один пример неконкурирующих антиферромагнитных взаимодействий J и J' на гексагональной решетке в 4-вершинной стандартной модели Поттса. В данном случае оба взаимодействия (в отличие от модели Изинга) требуют не антипараллельного расположения спинов в любой паре, а расположения спинов под углом $\arccos(-1/3)$, и это требование уже выполнено для любых численных значений J и J'. Аналогичное явление наблюдается в 4-вершинной стандартной модели Поттса на треугольной решетке.

8. Заключение

В данной работе в рассмотренных моделях на разных решетках исследовано возникновение самых разнообразных вариантов фазовых переходов и фрустраций — от отдельных точек фрустраций и фрустрационных полей до конечных и бесконечных линий фрустраций в пространстве параметров обменных взаимодействий и внешнего поля. В некоторых случаях фрустрации полностью подавляют фазовый переход для любых численных значений обменных взаимодействий. Подробно обсуждены уникальные особенности, присущие фрустрированным системам, которые не наблюдаются в системах без фрустраций. Это и разные типы фазовых диаграмм, и частичное упорядочение (упорядочение с понижением размерности). Наиболее поразительное свойство систем с фрустрациями — расщепление теплоемкости вблизи точек фрустраций и фрустрационных полей на острый лямбдаобразный онзагеровский пик и плавный куполообразный максимум, наблюдаемое во всех моделях на всех решетках, а также в различных экспериментах на реальных $3D$-кристаллах. Это и тот факт, что одни и те же обменные взаимодействия могут быть как конкурирующими, так и неконкурирующими, приводит к возникновению, либо к подавлению фрустраций.

Следует отметить еще одну важную особенность фрустрированных систем — особые трудности численных расчетов при компьютерном моделировании, главной причиной которых является наличие множества конфигураций с весьма близкими значениями внутренней энергии именно вблизи точек фрустраций и фрустрационных полей. Вследствие этого, а также отсутствия надежных критериев истинности, многие подходы и численные методы расчета, отлично работающие при описании систем без фрустраций, часто приводят к явным ошибкам и ложным эффектам при попытках описать поведение фрустрированных систем. Так, например, в работе Юу [16], посвященной исследованию антиферромагнитной модели Изинга на одиннадцати двумерных архимедовых решетках с учетом только взаимодействия между ближайшими соседями, и опубликованной в престижном журнале Physical Reviev E, приведены численные значения нультемпературной энтропии для всех одиннадцати решеток, в том числе и для квадратной и гексагональной, причем для этих решеток нультемпературная энтропия равна $\ln(2)$, что является ошибкой, поскольку из точных решений Онзагера [13] и Гутаппеля [8] следует, что она равна нулю в том и другом случае. В этом отношении весьма примечательна работа авторитетного специалиста в области компьютерного моделирования Биндера [17], посвященная исследованию ГЦК-решетки также с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями. В этой работе Биндер сделал следующие замечания:

1. Фазовая диаграмма отлична от всех предыдущих расчетов.

2. Все предыдущие подходы не согласуются с полученной диаграммой.

3. В заключение я нахожу серьезные недостатки в предыдущих исследованиях упорядочения на ГЦК-решетке, таких как методом кластерного варьирования,

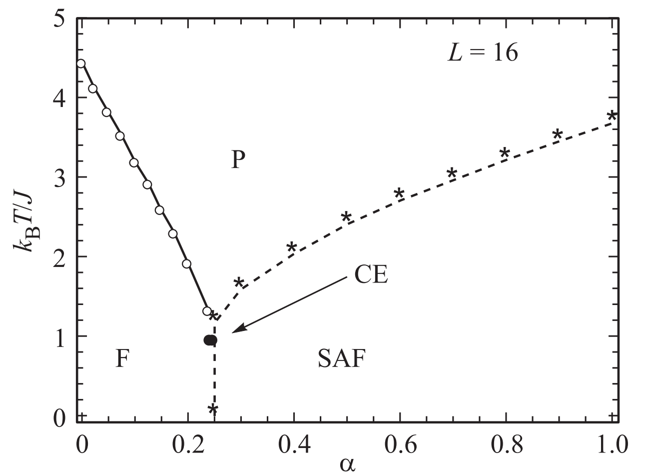

Рис. 13. Температура фазового перехода как функция фрустрационного параметра $\alpha = J_2/J_1$ в модели Изинга на простой кубической решетке [18].

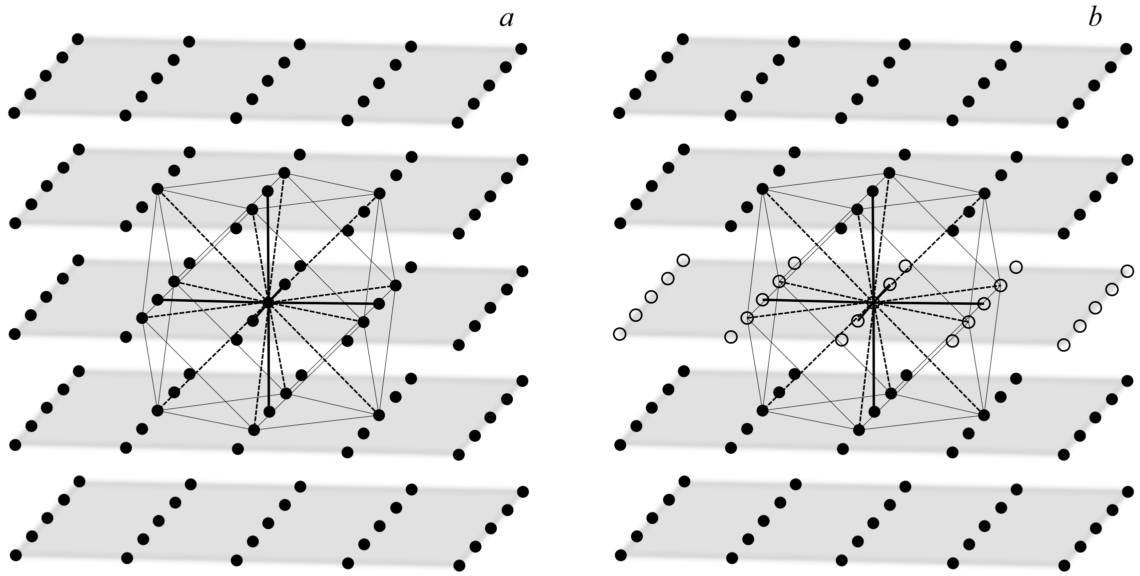

Рис. 14. Частичное упорядочение в модели Изинга на простой кубической решетке с конкурирующими ферромагнитными J и антиферромагнитными J' взаимодействиями.

которые не учитывают должным образом „фрустрационные эффекты".

Таким образом, следует учитывать все существенные особенности, присущие фрустрированным системам. В качестве примера рассмотрим проблему исследования на простой кубической решетке при учете ферромагнитного взаимодействия между ближайшими соседями J_1 и антиферромагнитного взаимодействия между вторыми соседями J_2 в модели Изинга, дискутируемую между авторами работ [18] и [19]. На рис. 13 приведена фазовая диаграмма из работы [18], на которой присутствуют два значения для температуры перехода в точке фрустраций со значением фрустрационного параметра $\alpha = J_2/J_1 = 0.25$. Главное различие результатов работ [18] и [19] заключается только в нулевом и ненулевом значении этой температуры перехода. При учете эффекта частичного упорядочения можно сделать вывод, что в первом случае должно наблюдаться понижение размерности из $3D$ в $1D$, а во втором из $3D$ в $2D$. Анализ внутренней энергии, свидетельствует о том, что единственно возможный вариант в простой кубической решетке, а именно, с $3D$ на $2D$, происходит с упорядочением трех семейств плоскостей типа $\{100\}$. Следовательно, температура перехода в точке фрустраций должна быть ненулевой. Рис. 14 иллюстрирует результаты этого анализа.

Список литературы

[1] H.T. Diep. *Frustrated spin systems*. World Scientific (2013). 644 c.
[2] G. Toulouse. Commun. Phys. **2**, 115 (1977).
[3] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
[4] F.A. Kassan-Ogly. Phase Transitions **71**, 39–55 (2000).
[5] A.I. Proshkin. JMMM **383**, 13–18 (2015).
[6] A. Proshkin, F. Kassan-Ogly. Mater. Sci. Forum **845**, 93 (2016).
[7] A. Kalz, A. Honecker, S. Fuchs, T. Pruschke. Eur. Phys. J. B **65**, 533 (2008).
[8] R.M.F. Houtappel. Physica **16**, 425 (1950).
[9] K. Kanô. Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
[10] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. JMMM **384**, 247–254 (2015).
[11] А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **149**, 357 (2016).
[12] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
[13] L. Onsager. Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
[14] T. Matsumara, H. Shida, T. Suzuki. Physica B: **230–232**, 738 (1997).
[15] H. Wada, H. Imai, M. Shiga. J. Alloys Compd. **218**, 73 (1995).
[16] U. Yu. Phys. Rev. E **91**, 062121 (2015).
[17] K. Binder. Phys. Rev. Lett. **45**, 811 (1980).
[18] O.D.R. Salmon. Int. J. Mod. Phys. B **27**, 1350162 (2013).
[19] R.A. dos Anjos. Phys. Rev. E **76**, 022103 (2007).