

10,11,05

Фазовые переходы в фрустрированных моделях Изинга (Обзор)

© А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступил в Редакцию 18 июня 2023 г.

В окончательной редакции 23 июня 2023 г.

Принят к публикации 24 июня 2023 г.

Рассмотрено современное состояние исследований фазовых переходов и критических явлений в фрустрированных моделях Изинга. Обсуждаются результаты, полученные на основе высокоэффективных алгоритмов метода Монте-Карло для моделей Изинга на решетках различных размерностей и типов. Основное внимание уделено результатам изучения фазовых переходов, критических и термодинамических свойств моделей Изинга с учетом обменных взаимодействий первых и вторых соседей, а также внешнего магнитного поля. Приводятся фазовые диаграммы зависимости критической температуры от величины обменного взаимодействия вторых соседей и внешнего магнитного поля. Определены области наблюдения фазовых переходов первого и второго рода. Установлены классы универсальности критического поведения. Для некоторых моделей установлены диапазоны с неуниверсальным критическим поведением. Обсуждаются особенности критического поведения фрустрированных моделей Изинга.

Ключевые слова: модель Изинга, фрустрации, фазовые переходы, метод Монте-Карло.

DOI: 10.21883/FTT.2023.09.56240.114

Содержание

1. Введение	1455
2. Модель Изинга	1456
3. Фрустрации в модели Изинга	1457
4. Фазовые переходы, магнитные, термодинамические и критические свойства фрустрированной модели Изинга	1458
4.1. Модель Изинга на квадратной решетке ..	1458
4.2. Модель Изинга на решетке кагоме	1462
4.3. Модель Изинга на простой кубической решетке	1464
4.4. Трехмерная модель Изинга на решетке с треугольными слоями	1466
4.5. Модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке	1468
5. Модели Изинга с фрустрациями в магнитном поле	1470
5.1. Модель Изинга на треугольной решетке в магнитном поле	1470
5.2. Модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке в магнитном поле ...	1472
6. Заключение	1472

1. Введение

Модель Изинга является самой простой и наиболее часто используемой при изучении кооперативных явле-

ний в статистической механике. Впервые модель Изинга была предложена и использована в работах Ленца [1] и Изинга [2]. В 1925 г. Изинг нашел решение для случая одномерной цепочки, хотя в решении не было фазового перехода (ФП) (в цепочке атомов ФП происходит при температуре $T = 0$) [2]. Прошло почти 20 лет, прежде чем Ларс Онзагер опубликовал решение для двумерного случая в отсутствие внешнего поля и доказал возможность существования ФП в двумерных системах [3]. Несмотря на многочисленные попытки исследователей, точного решения для трехмерной модели Изинга до сих пор не найдено.

Модель Изинга была изначально использована для теоретического описания магнитного ФП в ферромагнетиках. Будучи одной из немногих точно решенных моделей, она теперь служит эталоном при проверке новых теорий, приближений и численных алгоритмов. В течение многих лет модель Изинга рассматривалась как математическая модель. Однако, в магнетизме были найдены экспериментальные реализации модели Изинга. В настоящее время известно большое количество магнитных материалов, ряд свойств которых с успехом можно описать моделью Изинга. К ним относятся, например, фториды (MnF_2 , FeF_2 и др.). Теоретическое описание критического поведения этих соединений на основе модели Изинга хорошо согласуется с соответствующими экспериментальными данными. (Фториды, хотя и обладают изинговской анизотропией, проявляют и „гейзенберговские“ свойства — например в них имеются магнонные возбуждения, отсутствующие в модели Изинга).

Модель Изинга, помимо традиционных приложений в магнетизме, нашла множество приложений, тесно связанных с кооперативными явлениями в разных областях исследований. Модель Изинга и ее различные варианты доказали свою полезность в области статистической физики для моделирования ФП порядок-беспорядок в металлических сплавах, при переходе жидкость-газ и жидких смесей [4–6]. Изинговские модели также успешно используются для изучения различных коллективных явлений в биофизике [7]. Применение модели Изинга было найдено и в медицине, поскольку она позволяет моделировать рост опухоли или электромеханические альтернативы клеток сердца [8,9]. Конечно, вышеперечисленный список приложений модели Изинга далеко не полон. Тем не менее, этот список демонстрирует универсальность моделей, подобных модели Изинга для изучения большого количества разнообразных явлений и систем.

При описании критических явлений (КЯ) в решеточных системах наиболее часто используют различные варианты модели Изинга. На их основе была получена обширная информация о поведении различных термодинамических величин в широком диапазоне температур и других физических параметров. Исследования выполнены на решетках различного типа и пространственной размерности, а также при варьировании большого количества различных параметров. В последние годы методами вычислительной физики (ВФ) интенсивно исследуется и критическая область с вычислением значений критических индексов (КИ), при этом достигаемая точность не только не уступает, но и зачастую превосходит лучшие результаты других методов [10–12].

Настоящее время центр тяжести теоретических исследований переместился к изучению более реалистичных моделей Изинга с учетом многочисленных факторов, присущих реальным кристаллам и не учитываемых в рамках моделей первого приближения. К таким факторам относятся: анизотропия, примеси, диполь-дипольные взаимодействия, колебания решетки, фрустрации и др. [13,14]. В современной физике конденсированного состояния важное место занимают исследования сложных магнитных структур, таких, как сильно фрустрированные магнитные соединения и металлические наносистемы, спиновые стёкла, спиновый лед, аморфные и наногранулированные материалы, мультислойные нанопленки [15–17]. Физические свойства фрустрированных спиновых систем сильно отличаются от соответствующих систем без фрустраций. Природа ФП, магнитные структуры основного состояния, критические и термодинамические свойства спиновых систем с фрустрациями зависят от многих внешних факторов. Наличие фрустраций в системе может привести к новому физическому поведению. При исследовании влияния фрустраций на ФП, термодинамические, магнитные и критические свойства спиновых систем получено большое количество интересных результатов [18,19]. Несмотря на достигнутые успехи, на сегодняшний день все

еще остаются открытыми некоторые вопросы, касающиеся ФП, критических, термодинамических и магнитных свойств спиновых систем с фрустрациями.

Целью настоящей работы является обобщение результатов исследования ФП, критических, магнитных и термодинамических свойств фрустрированных спиновых систем, описываемых моделью Изинга. В данной работе представлен обзор результатов исследования фрустрированных моделей Изинга методом Монте-Карло (МК), в основном, на основе работ авторов данного обзора. Приведено сравнение наших результатов с литературными данными.

Модель Изинга и результаты ее исследований обсуждаются в разделе 2. Раздел 3 посвящен описанию эффектов фрустрации в моделях Изинга. Обсуждается влияние фрустраций на поведение модели Изинга. Результаты численных исследований ФП, магнитных и термодинамических свойств рассматриваются в разделе 4. В этом разделе обсуждаются условия возникновения и влияние фрустраций на физические свойства модели Изинга на различных типах решеток и размерностей. В разделе 5 приведены результаты численного эксперимента, полученные для моделей Изинга во внешнем магнитном поле. В заключении приведены краткие выводы.

2. Модель Изинга

В модели Изинга спины размещены в узлах d -мерной решетки. Спиновые переменные модели могут принимать только два значения ($+1$ или -1), и соответствуют двум возможным ориентациям спинов (вверх или вниз).

Гамильтониан модели Изинга можно представить в следующем виде:

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

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

Несмотря на относительную простоту модели Изинга, до сих пор точно решены только два частных случая с размерностями $d = 1$ и $d = 2$ [20]. Эти точные решения помогают оценить пригодность приближенных методов, используемых для исследования трехмерных моделей. Кроме того, эти модели могут служить хорошим приближением для некоторых реальных физических систем, ибо существует большой класс магнитных и немагнитных материалов, которые могут быть отнесены к одномерным или двумерным.

Отметим, что для случая трехмерной модели Изинга, до настоящего времени решение не найдено. Поэтому, интерес к исследованию модели Изинга, в частности методами численного эксперимента очень велик. Метод МК впервые был применен для расчета энергии и намагниченности двумерной модели Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями в работе [21].

Этот расчет воспроизводит точный результат Онзагера для энергии с погрешностью в пределах 1% в широкой области исключая непосредственную область критической точки. Подробное исследование модели Изинга на квадратной и простой кубической решетке было выполнено еще в 70-е годы [22–25]. В работах [24,25] методом МК исследована модель Изинга на простых решетках с периодическими граничными условиями (ПГУ) и свободными поверхностями, где получена довольно подробная информация об эффектах, связанных с малостью рассматриваемых решеток. Изучается также вопрос о влиянии свободной поверхности на свойства системы. В работе [25] обнаружена сильная зависимость энергии, намагниченности и восприимчивости от линейного размера системы. Показано, что при наложении на систему ПГУ эти зависимости слабее, более того, в низкотемпературной области параметр порядка не зависит от размера системы.

В последующие годы акцент сместился в сторону изучения моделей со сложными типами взаимодействий и на других классах решеток. Количество таких исследований велико, отметим только некоторые из них. Модель Изинга в дальнейшем изучалась с анизотропией (модель Изинга, в которой спины имеют большие значения) [26–29], с биквадратичным взаимодействием [30], в случайных полях [31,32], в магнитных полях [33–35], в поперечном поле [36], с трехспиновым взаимодействием [37], с четырехспиновым взаимодействием [38], в антиферромагнитных системах [39–44], с фрустрацией [45–56], со смешанным значением спина [57–60], с конкуренцией обменных взаимодействий [61–69], на декорированных решетках [59,60,70,71]. Модель Изинга в различных размерностях подробно изучена в [11], где получены одни из самых последних и высокоточных результатов для двух, трех и пятимерного случаев. Даны также основные базовые аспекты различных алгоритмов и применения конечно-размерного скейлинга (КРС). На основе этих исследований получена обширная информация о модели Изинга. Таким образом, точно рассчитаны параметры ближнего и дальнего порядка, вычислена внутренняя энергия, теплоемкость, а также и другие термодинамические величины, и КИ для модели Изинга и ее различных вариантов.

3. Фрустрации в модели Изинга

Термин „фрустрация“ впервые был использован в теории магнетизма Тулузом в 1977 г. [72]. Фрустрации в физике конденсированного состояния формулируются обычно как явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствии конкурирующих взаимодействий. Это приводит к сильному вырождению основного состояния системы с ненулевой энтропией при нулевой температуре. Возникновение фрустрации в системе может быть обусловлена

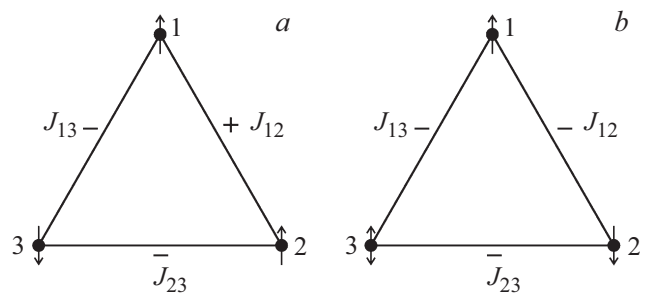


Рис. 1. Фрустрации в системе из трех спинов.

конкуренцией обменного взаимодействия или специфической геометрией решетки.

Рассмотрим три произвольных взаимодействующих между собой спина (рис. 1) и будем считать, что взаимодействия одинаковы по величине, но могут иметь разный знак. Если все три константы взаимодействия J_{12} , J_{23} и J_{13} оказались положительными, либо две из них — отрицательными (т.е. когда произведение взаимодействий вдоль треугольника положительно), то основное состояние (минимум энергии) этой трехспиновой системы будет единственным (с точностью до глобального изменения знака всех трех спинов) (рис. 1, *a*). Однако если произведение взаимодействий вдоль треугольника оказалось отрицательным (одно из взаимодействий отрицательно либо все три взаимодействия отрицательны), то основное состояние такой системы оказывается вырожденным. То есть, если мы зафиксируем первый спин „вверх“ и будем совершать обход вокруг треугольника, выставляя ориентацию спинов в соответствии с заданными взаимодействиями, то ориентация последнего, третьего, спина окажется неопределенной — энергии состояния „вверх“ и состояния „вниз“ — будут одинаковы. На рис. 1, *b* изображена ситуация, когда все три взаимодействия отрицательны. Если первый спин смотрит „вверх“, то в соответствии с $J_{12} < 0$ второй спин должен смотреть „вниз“, однако затем для третьего спина возникает неопределенность: в соответствии с $J_{23} < 0$ он должен смотреть „вверх“, а в соответствии с $J_{13} < 0$ он должен смотреть „вниз“. То же самое явление вырождения основного состояния происходит в любой замкнутой цепочке, состоящей из произвольного числа спинов, если произведение спин-спиновых взаимодействий вдоль цепочки отрицательно. Это явление получило название фрустрации.

Фрустрации существенно изменяют поведение системы по сравнению с соответствующей нефрустрированной системой. В спиновых системах фрустрации могут привести к колоссальному вырождению основного состояния, то есть в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния, которые благодаря своей большой энтропии могут вносить конечный (и даже

доминирующий) вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [73].

Теоретическая модель геометрической фрустрации, представленная Ванье [74], показала, что антиферромагнетик на треугольной решетке имеет совершенно другое поведение по сравнению с антиферромагнетиком на квадратной решетке и не имеет магнитного порядка до нулевой температуры. Геометрически фрустрированные антиферромагнетики составляют большой класс материалов, в которых фрустрация имеет чисто структурное происхождение и порождает сильно вырожденные основные состояния.

Исследование ФП и КЯ в фрустрированных спиновых системах традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом трудно преодолемых проблем, при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения таких систем [75,76]. Это связано с тем, что для таких моделей характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Эти и некоторые другие причины привели к тому, что ФП и КЯ в настоящее время интенсивно исследуются методами ВФ — методами МК [11,12,77], которые позволяют успешно исследовать критические свойства систем со сложными реалистичными гамильтонианами в широком диапазоне температур и других внешних параметров. Но обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. Поэтому в последнее время разработано много новых алгоритмов метода МК, которые позволяют преодолеть эти проблемы. Наиболее мощными и эффективными в исследовании ФП и КЯ в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы и алгоритм Ванга–Ландау метода МК [78,79].

4. Фазовые переходы, магнитные, термодинамические и критические свойства фрустрированной модели Изинга

4.1. Модель Изинга на квадратной решетке

Двумерная модель Изинга с взаимодействиями ближайших соседей хорошо исследована различными методами и подходами [2,80–82]. Эта модель на квадратной решетке с ферромагнитными взаимодействиями первых и вторых соседей была точно решена. Однако учет антиферромагнитных взаимодействий вторых соседей в классической двумерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз и ФП, а также влияет на критическое поведение модели [83].

В конце 1970-х годов первые ренормгрупповые расчеты и численное моделирование методом МК для двумерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых соседей

были проведены в работах [84,85]. Авторы указанных работ предположили, что в этой модели происходит ФП второго рода, вычислили температуру ФП и рассчитали КИ. В работах [84–87] также показано, что в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями первых и вторых соседей имеет место ФП второго рода. Кроме того, эта модель может обладать „аномальными“ КИ. Наряду с этим была обнаружена зависимость КИ от соотношения $r = J_2/J_1$, где J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия первых и вторых соседей соответственно. Но все же, сценарий непрерывного ФП оставался под вопросом после расчетов на основе теории среднего поля, которые указали на существование ФП первого рода [88]. Согласно результатам работ [89–91] для модели Изинга на квадратной решетке с ферромагнитными взаимодействиями первых соседей и антиферромагнитными взаимодействиями вторых соседей в диапазоне значений $r = 0.5–1.2$ в системе также должен наблюдаться ФП первого рода. Нами в работе [92] для антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке при значении $r = 1$ обнаружен ФП второго рода.

В данном разделе представлены результаты, полученные на основе репличного алгоритма метода МК для антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых соседей. Антиферромагнитная модель Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых соседей описывается следующим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle il \rangle} (S_i \cdot S_l), \quad (2)$$

где $S = \pm 1$ — изинговский спин. Первый член в формуле (2) учитывает обменное взаимодействие первых соседей ($J_1 < 0$), а второй — вторых соседей ($J_2 < 0$). Конкуренция обменных взаимодействий первых и вторых соседей приводит к появлению фрустраций в этой модели. Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20–150$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Соотношение обменного взаимодействия вторых и первых соседей менялось в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$.

Для определения температурного поведения теплоемкости и восприимчивости использовались выражения [93]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2), & T < T_N \\ (NK)\langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (4)$$

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка.

Параметр порядка системы m вычислялся с использованием выражения [94]:

$$m_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} S_i, \quad \text{где } \lambda = 1, 2, 3, 4, \quad (5)$$

$$m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)]/4, \quad (6)$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)]/4, \quad (7)$$

$$m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2}, \quad (8)$$

где m_1, m_2, m_3, m_4 — параметр порядка по подрешеткам.

На рис. 2–5 представлены температурные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ , полученные для $L = 80$ при различных значениях r (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для построения зависимостей). На рисунках видно, что для всех значений r вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы теплоемкости C и восприимчивости χ . Отметим, что уменьшение значения r в интервале $0.6 \leq r \leq 1.0$ сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов, как теплоемкости, так и восприимчивости. В интервале $0.1 \leq r \leq 0.4$ наблюдаем противоположную картину.

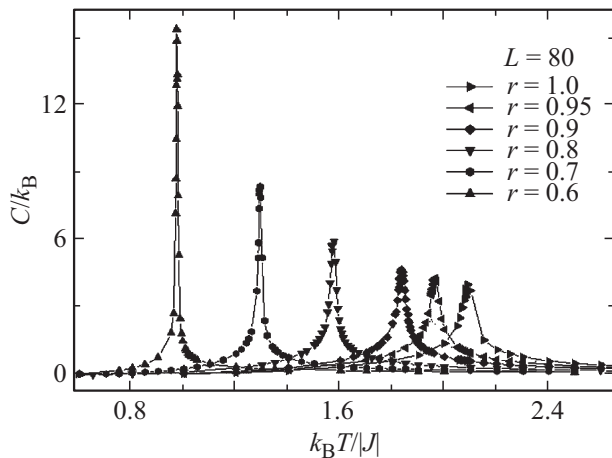


Рис. 2. Зависимость теплоемкости от температуры для различных r .

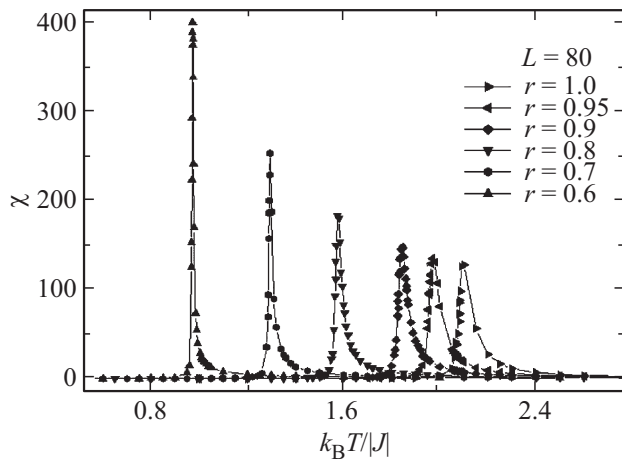


Рис. 3. Зависимость восприимчивости от температуры для различных r .

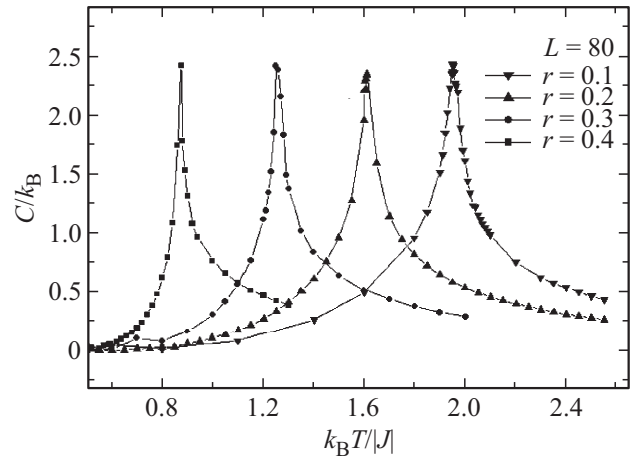


Рис. 4. Зависимость теплоемкости от температуры для различных r .

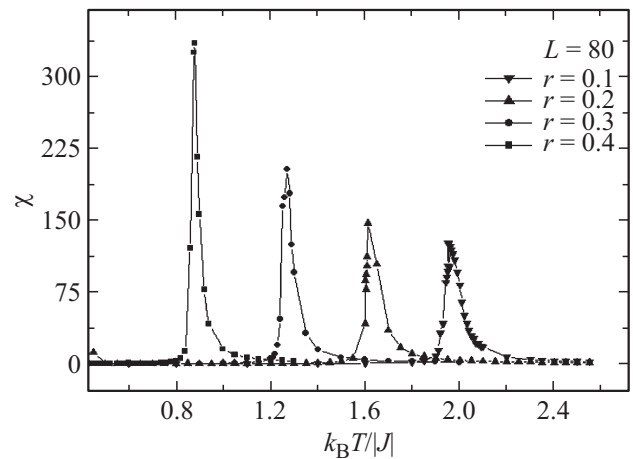


Рис. 5. Зависимость восприимчивости от температуры для различных r .

С уменьшением r от 0.4 до 0.1 температура ФП смещается в сторону более высоких температур.

Для определения критических температур T_N , нами использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка. Кумулянты четвертого порядка по намагниченности и энергии имеют вид [95]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (9)$$

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \quad (10)$$

где U_L — кумулянт по намагниченности, V_L — кумулянт по энергии.

Выражения (9) и (10) позволяют определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера дает возможность также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что в случае ФП второго рода

кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [95].

На рис. 6 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $r = 0.2$ для разных значений L . Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. На вставке видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r .

На рис. 7 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей. На этой диаграмме видно, что для значения $r = 0.5$ температура T_N принимает минимальное значение. Это объясняется тем, что для рассмотренной нами модели вблизи значения $r = 0.5$ в системе возникает фрустрированное состояние. Наличие фрустраций подтверждается поведением температурной зависимости

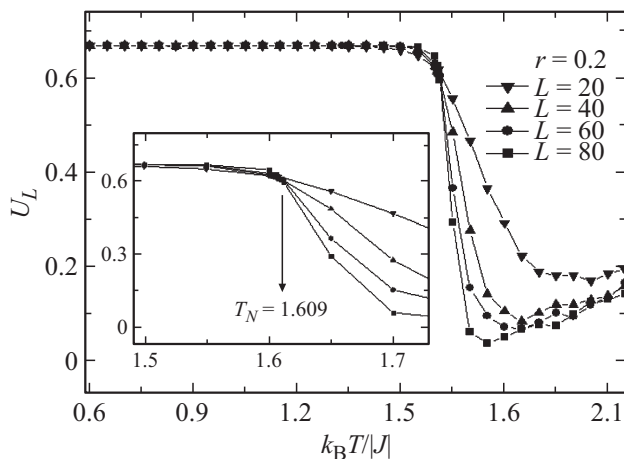


Рис. 6. Зависимости кумулянта Биндера от температуры для $r = 0.2$ при $L = 20, 40, 60$ и 80 .

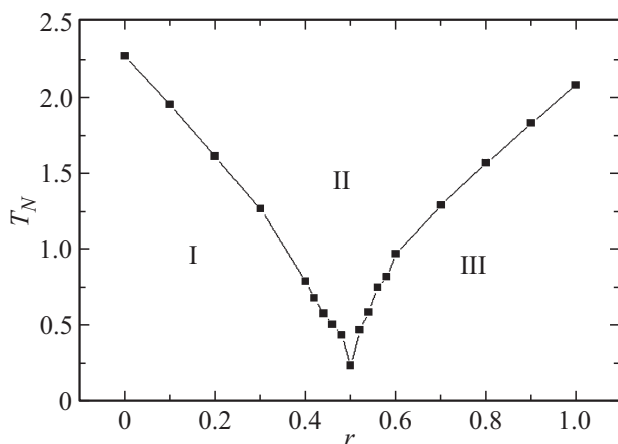


Рис. 7. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей для двумерной модели Изинга на квадратной решетке.

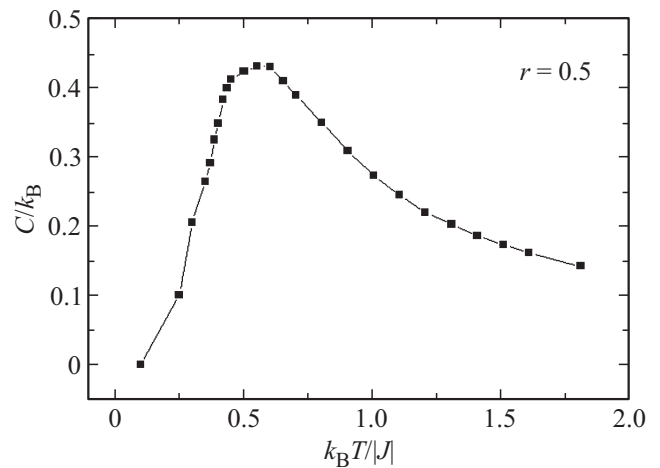


Рис. 8. Зависимость теплоемкости от температуры для $r = 0.5$ при $L = 150$.

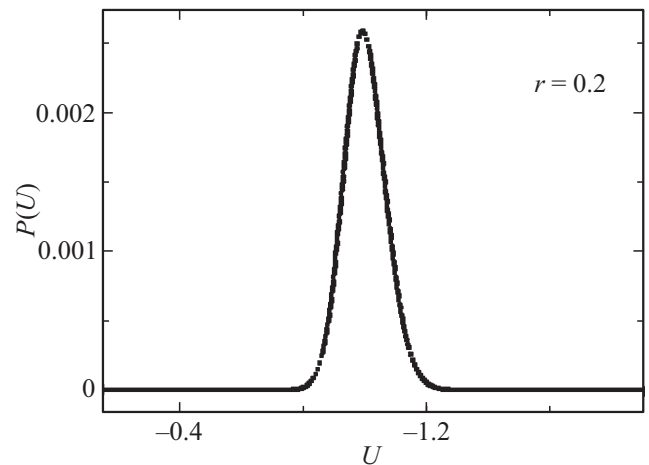


Рис. 9. Гистограмма распределения энергии для случая $r = 0.2$.

теплоемкости, которая представлена на рис. 8. На этом рисунке видно, что вблизи точки фрустрации ($r = 0.5$) теплоемкость не имеет острого максимума и наблюдается тенденция к размытию. Такое поведение теплоемкости является характерным для фрустрированных систем. На диаграмме мы видим, что вблизи точки $r = 0.5$ пересекаются три различные фазы: I — ферромагнитная, II — парамагнитная и III — суперантиферромагнитная (коллинеарная антиферромагнитная структура).

Анализ результатов наших исследований показывают, что в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода, кроме значений $r = 0.5$ и $r = 0.6$. Об этом свидетельствуют и результаты гистограммного анализа данных. На рис. 9 приведена гистограмма распределения энергии для случая $r = 0.2$. График построен вблизи критической точки для решетке $L = 150$. На рисунке наблюдается один максимум, что характерно для ФП второго рода [79]. Аналогичное поведение на гистограммах наблюдается для всех значений r в рассмотренном

Таблица 1. Значения критических параметров для модели Изинга на квадратной решетке

r	T_N	ν	α	β	γ	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
1.0	2.081(1)	0.830(1)	0.35(1)	0.09(1)	1.45(1)	0.25(1)	1.98
0.95	1.955	0.82	0.36	0.09	1.44	0.24	1.98
0.9	1.829	0.80	0.41	0.09	1.43	0.22	2.02
0.8	1.567	0.78	0.46	0.10	1.37	0.24	2.03
0.7	1.289	0.74	0.51	0.10	1.28	0.26	1.99
0.4	0.873	1.01	0.01	0.11	1.75	0.25	1.98
0.3	1.258	0.99	0.01	0.12	1.76	0.23	2.01
0.2	1.612	0.99	0.01	0.11	1.76	0.23	1.99
0.1	1.952	1.01	0.01	0.12	1.76	0.26	2.01
0.0	2.268	1	0.01	0.13	1.75	0.25	2.02
$r = 0.0$ [94]	2.262	1	0	0.125	1.75	—	2

интервале, кроме $r = 0.6$. Показано, что вблизи точки $r = 0.5$ система становится полностью фрустрированной, а для значения $r = 0.6$ на гистограмме наблюдаются два максимума, что характерно для ФП первого рода. В работе [96] авторы в интервале значений $r < 0.5$ обнаружили ФП второго рода. Однако, результаты этой работы показывают, что в интервале $0.5 < r < 0.948$ наблюдается переход первого рода. Данные, полученные в работе [96] частично совпадают с нашими результатами. Результаты более поздних работ, в которых было показано, что эта модель демонстрирует ФП второго рода в диапазонах $0.0 \leq r \leq 0.4$ и $0.67 \leq r \leq 1.0$ полностью соответствуют нашим данным [97,98].

Для расчета статических КИ теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β и радиуса корреляции ν применялись соотношения теории КРС. Из теории КРС следует, что в системе с размерами $L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения [99–102]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \tag{11}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{12}$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} g_{V_i}, \tag{13}$$

где g_{V_i} — постоянная, а в качестве V_i могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i = 1, 2, 3, 4), \tag{14}$$

Эти выражения были использованы для определения β , γ и ν .

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L использовалось выражение [101,103,104]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \tag{15}$$

где a — некоторый коэффициент.

Критические параметры рассчитывались для интервалов $0.0 \leq r \leq 0.4$ и $0.7 \leq r \leq 1.0$, в которых, согласно нашим данным, а также данным других авторов эта модель демонстрирует ФП второго рода [97,98].

На рис. 10 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_i , магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для $r = 0.3$. Углы наклона прямых определяют значения $1/\nu$, β/ν и γ/ν . По этой схеме было определено значение и для теплоемкости α/ν . Имея данные по ν , вычислялись статические КИ α , β и γ . Эта процедура использовалась для расчета КИ для значений $r = 1, 0.95, 0.9, 0.8, 0.7, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1$ и 0 . Все значения статических КИ, полученные таким образом, представлены в табл. 1.

Особо следует отметить процедуру, использованную нами для определения индекса Фишера η . Используя отношение между восприимчивостью χ и радиусом корреляции ξ [105]:

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}, \tag{16}$$

а также соотношение $\eta = 2 - \gamma/\nu$, связывающее индексы η и ν , получим

$$\ln(\chi/\xi^2) = c - \eta \ln \xi, \tag{17}$$

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

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L. \tag{18}$$

Полученные таким образом значения индекса Фишера также представлены в табл. 1. Сравнение численных значений КИ, полученные нами в данной работе с литературными данными [94] (для $r = 0.0$) показывает хорошее соответствие. КИ теплоемкости $\alpha = 0.342$ (5), параметра порядка $\beta = 0.103$ (3), восприимчивости $\gamma = 1.451$ (7) и радиуса корреляции $\nu = 0.84$ (1), рассчитанные в работах [94,106] в пределах погрешности совпадают с данными нашей работы при $r = 1$. Отметим, что для наших данных достаточно хорошо выполняются и скейлинговые соотношения, что свидетельствует о том, что КИ определены с хорошей точностью [107–110].

Как видно из таблицы критическая температура T_N уменьшается с уменьшением величины взаимодействия

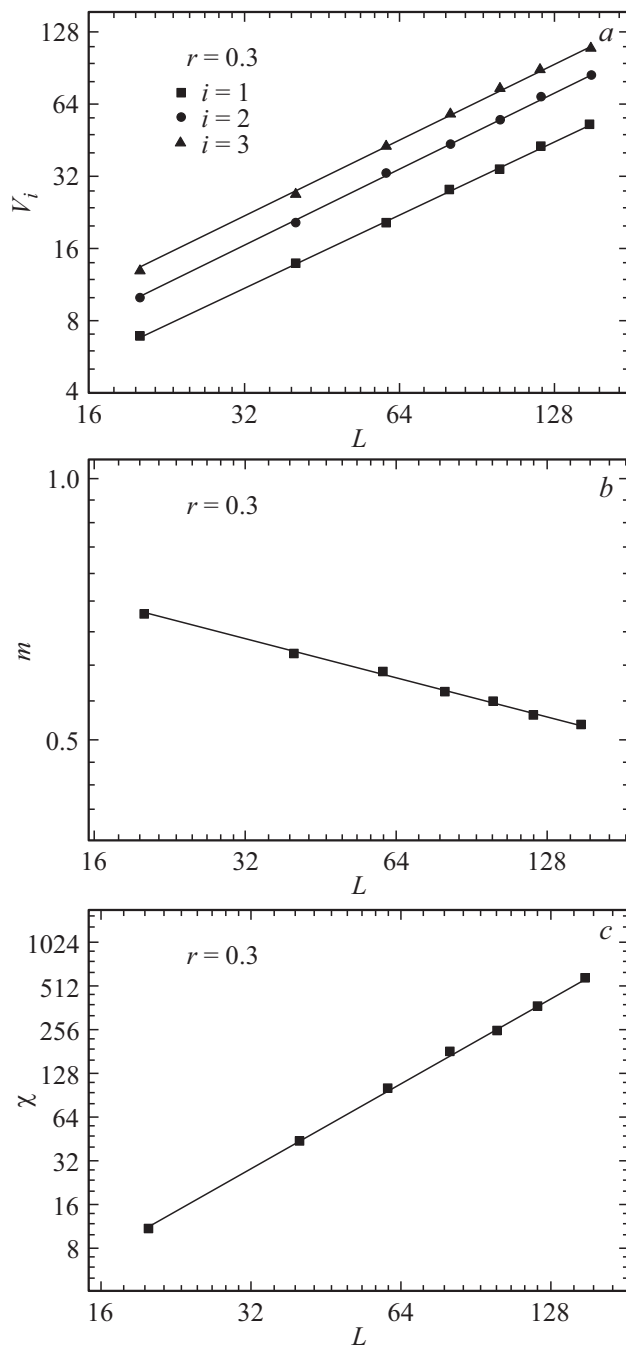


Рис. 10. Зависимость параметра V_i , параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для $r = 0.3$.

вторых соседей вплоть до значения $r = 0.4$. При дальнейшем уменьшении r критическая температура начинает расти. Численные значения КИ, приведенные в таблице, свидетельствуют, что в интервале $0.7 \leq r \leq 1.0$ все КИ меняются с изменением r . В интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$ все индексы совпадают с данными Онзагера, и не зависят от величины r .

Следовательно, мы можем сделать вывод, что класс универсальности критического поведения модели Изин-

га с учетом антиферромагнитных взаимодействий вторых соседей сохраняется в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$. Из табл. 1 видно, что в исследуемой модели существуют две области, которые характеризуются различным критическим поведением. Можно утверждать, что изменение величины взаимодействия вторых соседей приводит к неуниверсальному критическому поведению в интервале $0.7 \leq r \leq 1.0$.

4.2. Модель Изинга на решетке кагоме

Спиновые системы, имеющие решетку Кагоме, вследствие особой геометрии могут быть сильно фрустрированы. В таких системах с понижением температуры процесс упорядочения происходит гораздо медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Это обусловлено тем, что в системах с меньшим координационным числом возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и локально вырожденные состояния [111,112]. При учете обменных взаимодействий только между ближайшими соседями ФП в магнитоупорядоченное состояние не реализуется ни при каких конечных значениях температуры. Учет обменных взаимодействий вторых соседей частично снимает вырождение, и может привести к появлению дальнего порядка и возникновению ФП при отличных от нуля температурах [113]. Тем не менее, поскольку эффекты фрустраций все еще имеют место, процесс упорядочения и стабилизации структур в отличие от нефрустрированных систем сильно замедлен [114].

Одним из интенсивно исследуемых в последние годы фрустрированных моделей является двумерная антиферромагнитная модель Изинга на решетке кагоме [115]. Данная модель является примером геометрически фрустрированной системы. В этой модели с взаимодействиями ближайших соседей в основном состоянии энтропия, приходящаяся на один спин, отлична от нуля [116]. В такой системе спиновое упорядочение и дальний порядок подавлены из-за эффектов фрустраций. Однако, учет взаимодействий вторых соседей стабилизирует упорядоченное спиновое состояние, и система проявляет ФП [114,115].

Рассмотрена двумерная антиферромагнитная модель Изинга на решетке кагоме с учетом взаимодействий первых и вторых соседей. Интерес к этой модели обусловлен тем, что она может быть использована для описания реальных материалов и соединений [116–118]. В работе [118] показано, что в семействе соединений $M\text{Fe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$ ($M = \text{H}_3\text{O}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Ag}, \text{NH}_4, \text{Tl}, \text{Pb}, \text{Hg}$) с минералогическим названием ярозиты, магнитные ионы железа Fe^{3+} образуют решетку кагоме в c -плоскости. Согласно экспериментальным данным взаимодействия между ближайшими спинами внутри и между слоями антиферромагнитные [119]. Поскольку в ярозитах соседние слои с Fe^{3+} отделены немагнитными ионами S, O, K и OH, межплоскостной обмен значительно меньше внутривоскостного. Кроме того, известно,

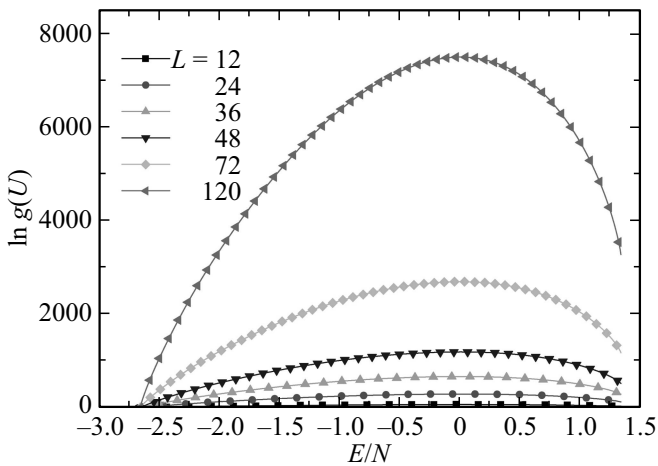


Рис. 11. Плотность состояний энергии $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L для двумерной модели Изинга.

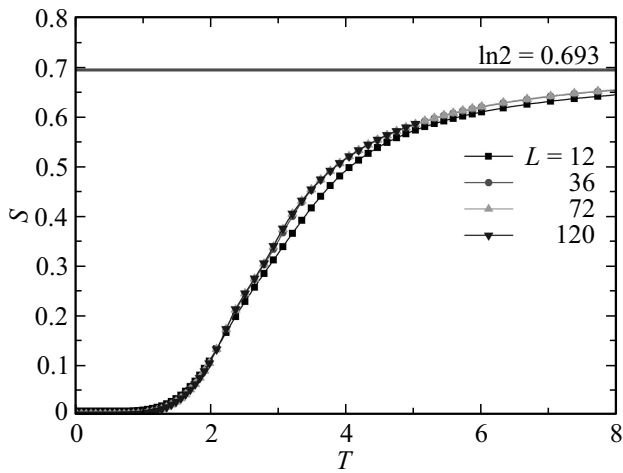


Рис. 12. Температурные зависимости энтропии.

что в изинговских системах на решетке кагоме ФП возможны только при ферромагнитном взаимодействии вторых соседей [120].

Антиферромагнитная модель Изинга на решетке кагоме с учетом взаимодействий первых и вторых соседей описывается следующим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l). \quad (19)$$

Первый член в формуле (19) учитывает антиферромагнитное обменное взаимодействие ближайших соседей величиной $J_1 < 0$, а второй — ферромагнитное взаимодействие вторых соседей $J_2 > 0$. В данной работе нами рассмотрен случай $J_1 = -1$ и $J_2 = 1$.

Для исследования данной модели нами был использован алгоритм Ванга–Ландау метода МК. Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $L = 12-120$, число частиц в системе составляло $N = 3/4 \times L \times L$.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использовались выражения (3), (4). Параметр порядка системы вычислялся с помощью выражения [114]:

$$m = \frac{1}{3} (|m_1| + |m_2| + |m_3|), \quad (20)$$

где m — намагниченность подрешетки.

Плотность состояний энергии $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L представлена на рис. 11. Из графика видно, что вырождение основного состояния в данной системе отсутствует. Мы считаем, что это обусловлено тем, что в данной модели учитывается обменное взаимодействие вторых соседей, которое может способствовать снятию вырождения.

Температурные зависимости энтропии S при различных линейных размерах системы приведены на рис. 12. На этом рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия системы стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 2$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия системы стремится к нулю, в то время как для данной модели с взаимодействиями только ближайших соседей, энтропия стремится к значению отличному от нуля. Такое поведение энтропии свидетельствует о существенном влиянии взаимодействий вторых соседей на термодинамические свойства модели.

На рис. 13 и 14 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости, полученные при различных линейных размерах системы. Отметим, что как для теплоемкости, так и для восприимчивости наблюдается необычное поведение, которое характеризуется наличием двойного максимума. На графиках видно, что с увеличением линейных размеров решетки наблюдается рост абсолютных значений максимумов теплоемкости и восприимчивости. При этом двухпиковая структура становится более отчетливой. Такое поведение связано с конкуренцией первых и вторых

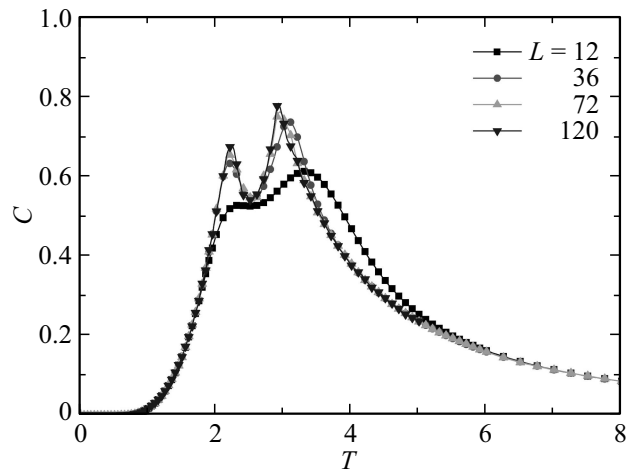


Рис. 13. Температурные зависимости теплоемкости.

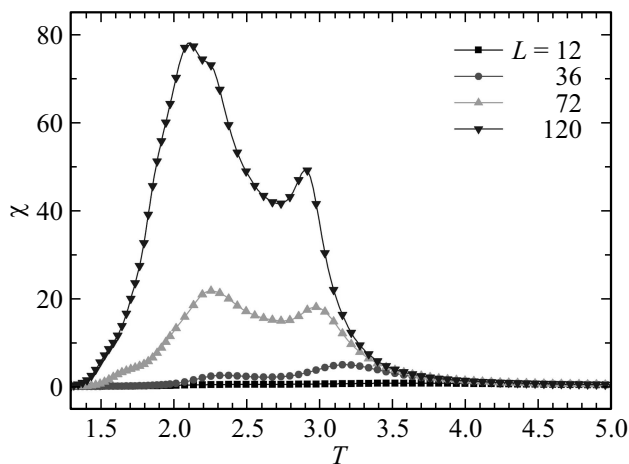


Рис. 14. Температурные зависимости восприимчивости.

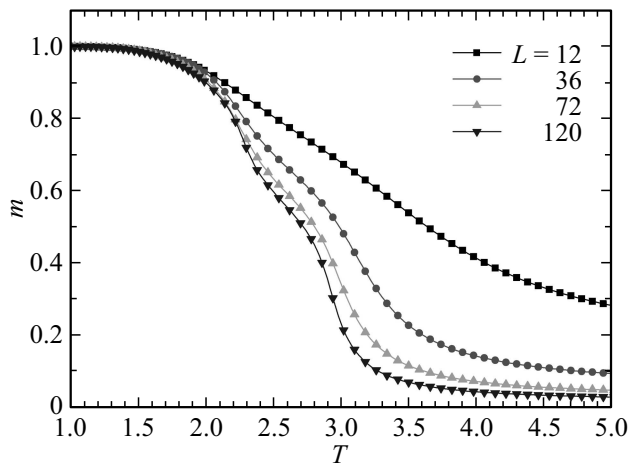


Рис. 15. Температурные зависимости параметра порядка.

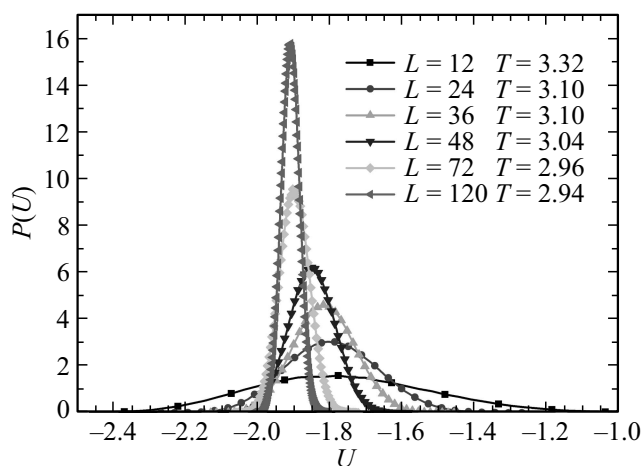


Рис. 16. Гистограммы распределения энергии.

соседей. Можно предположить, что первый максимум на графиках обусловлен переходом системы из упорядоченного состояния в частично неупорядоченное состояние, а второй пик соответствует переходу системы в парамагнитное состояние.

Температурные зависимости параметра порядка m при различных линейных размерах системы приведены на рис. 15. Как видно из рисунка на графиках наблюдаются необычное поведение параметра порядка. Эти особенности приходятся на те же значения температур, при которых наблюдались два максимума на графиках теплоемкости и восприимчивости (рис. 13 и 14). Очевидно, что такое поведение параметра порядка также связано с наличием конкуренции обменных взаимодействий в системе.

На рис. 16 приведены гистограммы распределения энергии для систем с различными линейными размерами. Графики построены вблизи точки, соответствующей температуре второго максимума теплоемкости. В связи с тем, что температуры максимумов теплоемкости для систем с разными линейными размерами отличаются, на графиках приведены соответствующие максимумам температуры. Все гистограммы нормированы таким образом, чтобы интеграл от него (суммарная вероятность всех энергетических состояний) равнялся единице. На графиках мы наблюдаем один пик, что характерно для ФП второго рода [94,121,122]. Анализируя наши данные можно предположить, что учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей в двумерной антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоме приводит к появлению ФП второго рода и способствует необычному поведению термодинамических параметров в их температурной зависимости [123].

4.3. Модель Изинга на простой кубической решетке

В данном разделе представлены результаты исследования ФП антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых соседей внутри слоев в интервале значений $0.0 \leq r \leq 1.0$. Эта модель является частным случаем модели исследуемой в работах [124,125], когда взаимодействие вторых соседей между слоями равно нулю.

Антиферромагнитная модель Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых соседей описывается следующим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l). \quad (21)$$

Решетка состоит из двумерных квадратных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (21) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями ($J_1 < 0$). Второй член характеризует антиферромагнитное взаимодействие вторых соседей, находящихся в том же слое ($J_2 < 0$). Учет антиферромагнитного взаимодействия вторых соседей приводит к возникновению фрустрации в этой модели.

Для исследования данной модели был использован репличный обменный алгоритм метода МК. Расчеты

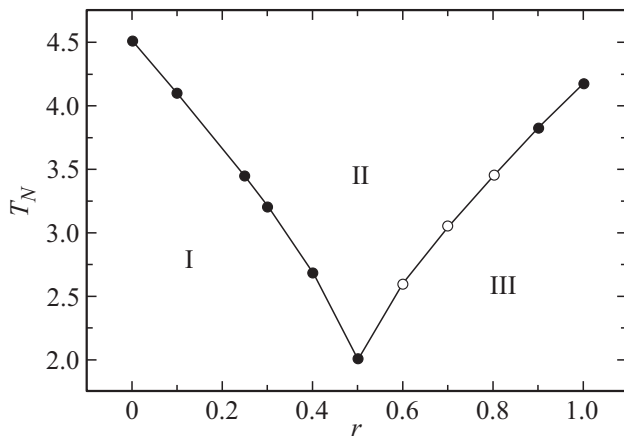


Рис. 17. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей для модели Изинга на кубической решетке.

проводились для систем с ПГУ и с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 30-90$.

Параметр порядка системы m вычислялся, используя выражения (6)–(8). Значение m_λ вычислялось, используя выражение

$$m_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} (-1)^z S_i, \quad (22)$$

где z — номер слоя решетки.

Для определения критической температуры T_N для всех значений r использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка.

На рис. 17 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей. На этой диаграмме видно, что вблизи точки $r = 0.5$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная — I, парамагнитная — II и суперантиферромагнитная (коллинеарная) — III. Магнитная структура основного состояния суперантиферромагнитной фазы была нами подробно рассмотрена в работе [126], а что касается антиферромагнитной и парамагнитной фаз, то их магнитные структуры хорошо известны.

Нами рассматривались переходы из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную. Переход из антиферромагнитной фазы в суперантиферромагнитную нами не рассматривался. Мы предполагаем, что на границе этих фаз имеется область сосуществования обеих фаз.

На диаграмме видим, что в интервале значений $0.0 \leq r \leq 0.5$ переход из фазы I в фазу II является ФП второго рода (темные кружки на графике). Аналогичная картина наблюдается и для значений $r = 0.9$ и $r = 1.0$, при которых в системе происходит переход из фазы III в фазу II. В интервале значений $0.6 \leq r \leq 0.8$, где имеет место переход из фазы III в фазу II, наблюдается ФП первого рода (светлые кружки на графике).

Для более подробного анализа рода ФП использовался гистограммный анализ данных метода МК. Результаты нашей работы показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 18. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 36, 48$ и 90 для случая $r = 0.3$. Графики построены для температуры $T = T_N$. Из рис. 19 видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдаются один хорошо выраженный максимум, который растет с увеличением линейных размеров системы. Такое поведение свидетельствует в пользу ФП второго рода. Аналогичная картина наблюдается во всем интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$ и для значения $r = 0.9$.

Что касается перехода из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу, мы обнаружили, что в интервале значений $0.6 \leq r \leq 0.8$ наблюдается ФП первого рода. Это показано на рис. 19. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для

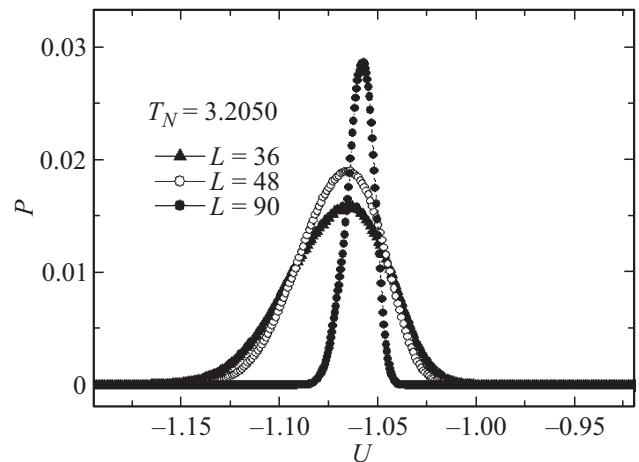


Рис. 18. Гистограммы распределения энергии для случая $r = 0.3$.

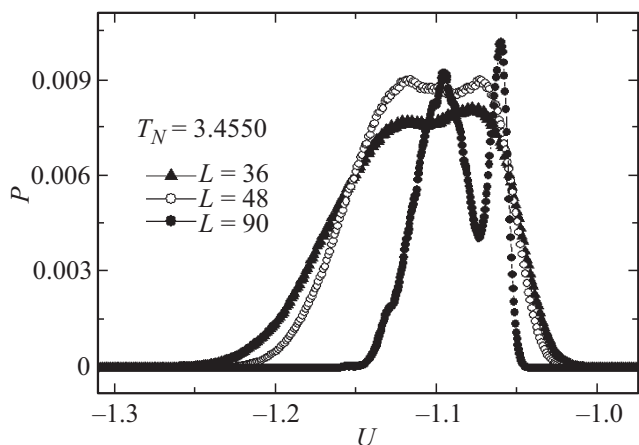


Рис. 19. Гистограммы распределения энергии для случая $r = 0.8$.

Таблица 2. Значения критических параметров для антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке

r	T_N	ν	α	β	γ	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Нефруст. Модель Изинга [128]	4.5111(3)	0.6305(25)	0.108(9)	0.3265(25)	1.239(4)	0.037(3)	2
0.0	4.5110(2)	0.630(5)	0.110(5)	0.320(5)	1.241(5)	0.03(1)	1.991
0.1	4.1020(2)	0.625(5)	0.115(5)	0.317(5)	1.238(5)	0.02(1)	1.986
0.2	3.4440(2)	0.633(5)	0.119(5)	0.328(5)	1.237(5)	0.04(1)	2.012
0.3	3.2050(2)	0.624(5)	0.118(5)	0.319(5)	1.243(5)	0.02(1)	1.999
0.4	2.6820(2)	0.632(5)	0.110(5)	0.322(5)	1.245(5)	0.02(1)	1.999
0.9	3.8250(2)	0.550(5)	0.339(5)	0.249(5)	1.188(5)	-0.14(1)	2.025
1.0	4.1730(2)	0.549(5)	0.330(5)	0.245(5)	1.190(5)	-0.16(5)	2
$r = 1.0$ [129]	1.355(2)	0.55(2)	0.33(5)	–	–	-0.28(6)	–
$r = 1.0$ [130]	1.347(1)	0.56(2)	0.32(2)	0.25(2)	–	-0.10(2)	–

случая $r = 0.8$ при различных линейных размерах L . Из рисунка видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые растут с увеличением линейных размеров системы. Наличие двойного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует о ФП первого рода. Аналогичная картина наблюдается во всем интервале $0.6 \leq r \leq 0.8$. Анализ наших данных показывает, что учет взаимодействий вторых соседей внутри слоев при определенных величинах взаимодействия приводит к смене ФП [127].

Для расчета статических КИ применялись соотношения теории КРС. Процедура расчета КИ описана в разделе 4.1. Эта процедура использовалась для расчета КИ для исследуемой модели в диапазоне $0.0 \leq r \leq 0.5$, а также для значений $r = 0.9$ и 1.0 , где наблюдается ФП второго рода. Все значения статических КИ, полученные таким образом, представлены в табл. 2 [127].

Для значения $r = 0.5$ рассчитать критические параметры с допустимой погрешностью не удалось. Предполагаем, что это связано с тем, что в этой точке сосуществуют три различные фазы. Сравнение численных значений КИ, полученные нами в данной работе с литературными данными показывает хорошее соответствие, критические параметры для данной модели для различных значений r рассчитаны нами впервые.

Как видно из табл. 2, критическая температура T_N уменьшается с увеличением величины взаимодействия следующих соседей вплоть до значения $r = 0.4$. При дальнейшем увеличении r критическая температура начинает расти. Все значения КИ, рассчитанные нами в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$, в пределах погрешности совпадают со значениями КИ трехмерной нефрустрированной модели Изинга [128]. Это свидетельствует о принадлежности данной модели в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$ к тому же классу универсальности критического поведения, что и нефрустрированная модель Изинга. Значения КИ, рассчитанные нами для $r = 0.9$ и 1.0 , хорошо согласуются с теми, что получены в работах [129,130] для полностью фрустрированной трехмерной модели

Изинга на кубической решетке, но они сильно отличаются от данных, полученных нами для этой модели в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$. Можно предположить, что учет взаимодействий вторых соседей внутри слоев решетки для антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке приводит в определенном интервале значений $0.8 < r \leq 1.0$ к смене класса универсальности критического поведения. При этом КИ совпадают с данными для трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на кубической решетке [131,132].

4.4. Трехмерная модель Изинга на решетке с треугольными слоями

Двумерная антиферромагнитная модель Изинга на решетке с треугольными слоями является относительно простой геометрически фрустрированной моделью. В данной модели, где взаимодействие ограничено только ближайшими соседями, спиновое упорядочение сильно подавлено из-за эффектов фрустраций. В результате в данной системе ФП отсутствует при любой конечной температуре [133–135]. Учет взаимодействий вторых соседей в этой модели играет существенную роль, вызывая различные виды дальнего порядка в зависимости от величины и знака взаимодействия вторых соседей [136].

Теоретические и численные исследования трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на решетке с треугольными слоями оказались спорными. Теория Ландау–Гинзбурга–Вильсона предсказала $3d XY$ -поведение для наблюдаемого магнитного ФП [137,138]. Позже, результаты моделирования методом МК дали результаты, характерные для трикритического поведения [139]. Более поздние исследования с использованием гистограммного метода МК и теории КРС, показали набор КИ, который отличается от трикритического поведения и довольно близок к $3d XY$ -модели [140,141].

В работе [142] авторами изучены упорядоченные фазы и ФП в модели Изинга на решетке с треугольными слоями с сильным межслойным взаимодействием. Эта модель может быть использована для описания соединений CsCoC_{13} и CsCoBr_3 . Вычисления, проведенные для

них в рамках приближения среднего поля [143], а также кластерным вариационным методом [144], показывают, что одна из трех магнитных подрешеток возможно не упорядочена.

Вместе с тем, результаты метода МК показывают, что такие частично неупорядоченные состояния описываются модой со случайно изменяющейся в пространстве и во времени фазой [145,146]. Данными результатами можно объяснить наблюдаемые заметные флуктуации во времени магнитной структуры [147].

Результаты МК-моделирования изинговского антиферромагнетика на решетке с треугольными слоями с учетом антиферромагнитных взаимодействий вторых соседей указывают на существование ФП первого рода между низкотемпературной двухподрешеточной антиферромагнитной фазой и высокотемпературной парамагнитной фазой. Этот сценарий отличается от того, который наблюдается, когда взаимодействия первых соседей являются ферромагнитным. Для такого случая, в изолированных слоях фаза Березинского–Костерлица–Таулеса возникает при промежуточной температуре между трехподрешеточной ферромагнитной фазой при низкой температуре и парамагнитной фазой при высокой температуре [148].

На сегодняшний день остаются спорными некоторые вопросы, связанные с влиянием величины межслойного обменного взаимодействия на ФП изинговских антиферромагнетиков. В данном разделе представлены результаты исследования ФП антиферромагнитной модели Изинга на решетке с треугольными слоями с различными значениями межслойного обменного взаимодействия. Антиферромагнитная модель Изинга на решетке с треугольными слоями описывается гамильтонианом

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) - J_3 \sum_{\langle i,k \rangle} (S_i \cdot S_k), \quad (23)$$

где $J_1 < 0$, $J_2 < 0$ и $J_3 > 0$ — константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (23) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковой внутри слоя, второй член характеризует межслойное антиферромагнитное взаимодействие и третий член характеризует ферромагнитное взаимодействие вторых соседей внутри слоев. При расчётах, мы принимаем, что $|J_1| = |J_3| = 1$ и меняем значение J_2 . $r = J_2/J_1$ — соотношение межслойного и внутрислойного обменов. Рассматривается интервал значений $0.01 < r \leq 1.0$. Исследования проводились на основе алгоритма Ванга–Ландау и репличного обменного алгоритма метода МК. Расчеты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 18-90$.

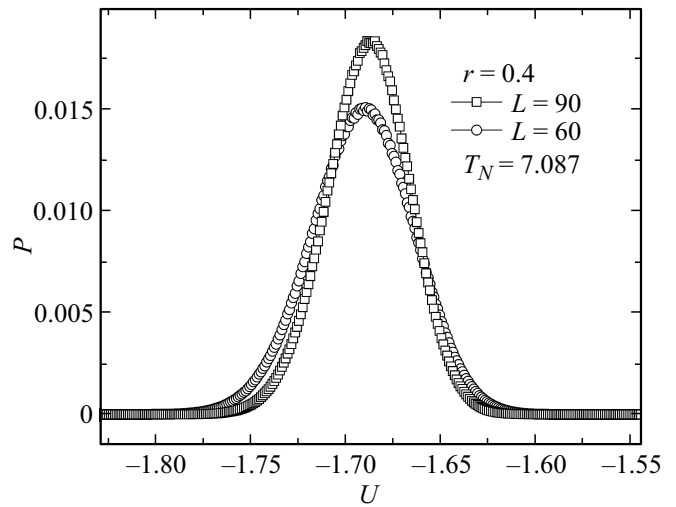


Рис. 20. Гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ и $L = 90$ для $r = 0.4$.

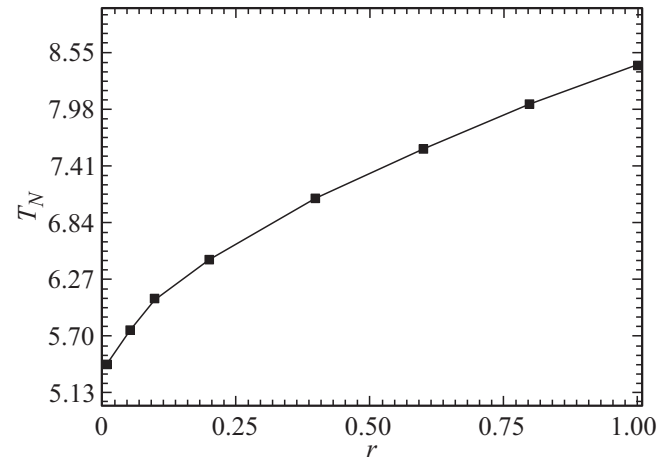


Рис. 21. азовая диаграмма зависимости критической температуры от величины межслойного обменного взаимодействия для трехмерной модели Изинга на треугольной решетке.

Параметр порядка системы m вычислялся, используя выражение [149]:

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle / 3}, \quad (24)$$

где M_A , M_B и M_C — намагниченности трех подрешеток.

Для определения критической температуры T_N , использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка. Значения критических температур, полученные для рассмотренных значений r приведены в табл. 3.

Для анализа рода ФП использовался гистограммный метод анализа данных метода МК [94,150]. Результаты нашей работы показывают, что ФП для всех рассмотренных нами значений r являются переходами второго рода. Это продемонстрировано на рис. 20, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ и 90 для $r = 0.4$. Из

Таблица 3. Значения критических параметров для модели Изинга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием

r	T_N	ν	α	β	γ	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
0.01	5.420(1)	0.577(15)	0.26(5)	0.284(15)	0.81(5)	0.59(10)	1.6
0.05	5.751(1)	0.592(15)	0.22(5)	0.292(15)	0.88(5)	0.51(10)	1.6
0.1	6.066(1)	0.651(15)	0.05(5)	0.370(15)	1.19(5)	0.16(10)	1.98
0.2	6.465(1)	0.648(15)	0.05(5)	0.365(15)	1.21(5)	0.13(10)	1.99
0.4	7.087(1)	0.660(15)	0.02(5)	0.369(15)	1.20(5)	0.18(10)	1.95
0.6	7.5850(1)	0.648(15)	0.07(5)	0.362(15)	1.17(5)	0.19(10)	1.96
0.8	8.031(1)	0.652(15)	0.05(5)	0.373(15)	1.20(5)	0.15(10)	1.99
1.0	8.427(1)	0.650(15)	0.05(5)	0.370(15)	1.16(5)	0.21(10)	1.95

представленных гистограмм следует, что в зависимости вероятности P от энергии U наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода. Аналогичный результат получен и для всех остальных значений r .

На рис. 21 приведена фазовая диаграмма, характеризующая зависимость критической температуры от величины межслойного обменного взаимодействия. На диаграмме видно, что уменьшение межслойного обменного взаимодействия приводит к уменьшению температуры ФП. Анализ наших данных показывает, что в рассмотренном интервале r переход из неупорядоченной фазы в упорядоченную является ФП второго рода [151].

В табл. 3 представлены, значения КИ для всех рассмотренных значений r , рассчитанные на основе соотношений теории КРС. Как видно из таблицы численные значения КИ в интервале $0.05 < r \leq 1.0$ в пределах погрешности совпадают между собой. Отметим так же, что с достаточно высокой точностью выполняются скейлинговые соотношения между КИ. При этом значения КИ в интервале $0.05 < r \leq 1.0$ не зависят от величины межслойного взаимодействия и в пределах погрешности совпадают между собой и не соответствуют какому-либо известному классу универсальности критического поведения. При $r \leq 0.05$ значения КИ существенно меняются и уже не выполняются скейлинговые соотношения между ними. Можно предположить, что при значении $r = 0.05$ в системе происходит кроссовер от трехмерного критического поведения к квазидвумерному [152,153].

4.5. Модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке

В данном разделе нами представлены результаты исследований ФП и термодинамических свойств антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК-решетке с учетом взаимодействий вторых соседей, полученные на основе репличного обменного алгоритма (REMC) и алгоритма Ванга–Ландау (WLA) метода МК.

Теоретические расчеты и численное моделирование методом МК для модели Изинга на ОЦК-решетке были

проведены в работах [154–159]. Результаты теоретических исследований свидетельствуют, что для модели Изинга на простой кубической решетке и на ОЦК-решетке имеет место ФП второго рода [155–157]. Согласно результатам работ [158,159] следует, что при увеличении величины взаимодействия вторых соседей в системе происходит смена ФП второго рода, на ФП первого рода. Учет взаимодействия вторых соседей в этой модели может приводить к возникновению фрустраций.

Антиферромагнитная модель Изинга на ОЦК-решетке с учетом взаимодействий первых и вторых соседей описывается следующим гамильтонианом [160]:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l). \quad (25)$$

Первый член в формуле (25) учитывает обменное взаимодействие первых соседей ($J_1 < 0$), а второй — вторых соседей ($J_2 < 0$). $r = J_2/J_1$ — величина взаимодействия вторых соседей. Расчёты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12-90$. Соотношение обменного взаимодействия вторых и первых соседей менялось в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$.

На рис. 22 и 23 представлены температурные зависимости энергии и теплоемкости, полученные на основе репличного обменного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау. Эти рисунки демонстрируют, что данные полученные разными алгоритмами достаточно хорошо соответствуют друг другу. Это позволяет говорить о надежности и точности полученных в работе результатов.

На рис. 24 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей. На диаграмме видно, что в точке $r = 2/3$ пересекаются три различные фазы: AF1 — антиферромагнитная, PM парамагнитная и AF2 антиферромагнитная 2-го типа [157,158]. На фазовой диаграмме стрелками изображены направления спинов в подрешетках. На рис. 25 приведены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели для значения $r = 2/3$, полученные с помощью алгоритма Ванга–Ландау (черными и светлыми кружками изображены направления спинов). На этом рисунке цифрами 1–6 показаны все возможные магнитные структуры основного состояния, наблюдаемые в данной модели.

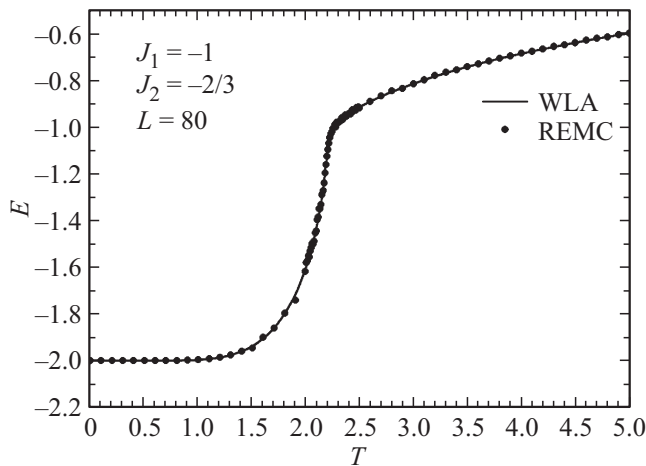


Рис. 22. Температурные зависимости энергии.

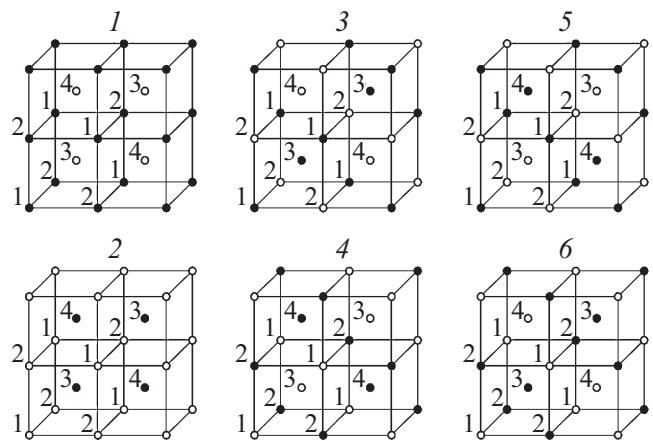


Рис. 25. Магнитные структуры основного состояния для значения $r = 2/3$.

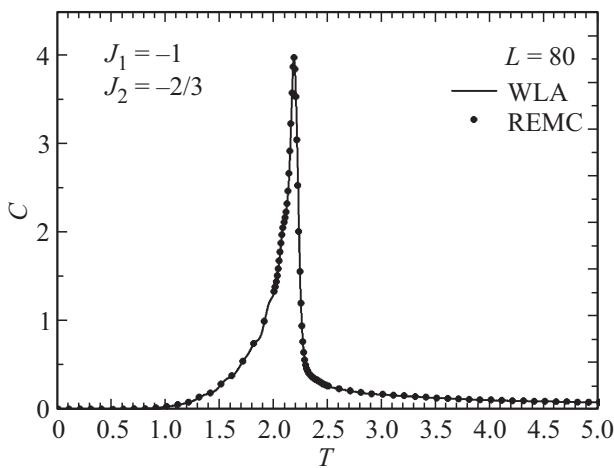


Рис. 23. Температурные зависимости теплоемкости.

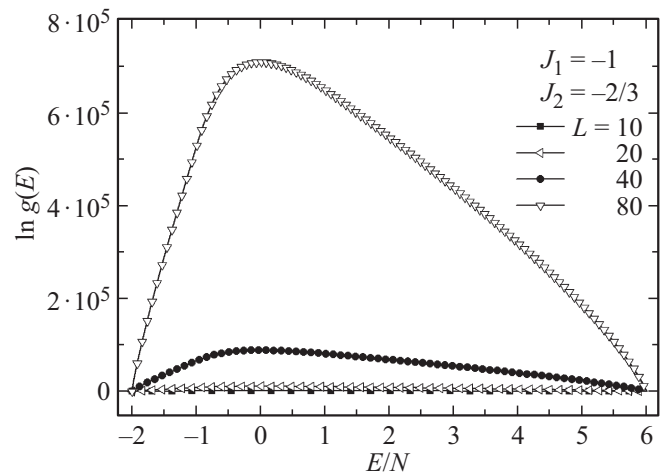


Рис. 26. Плотность состояний энергии $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L .

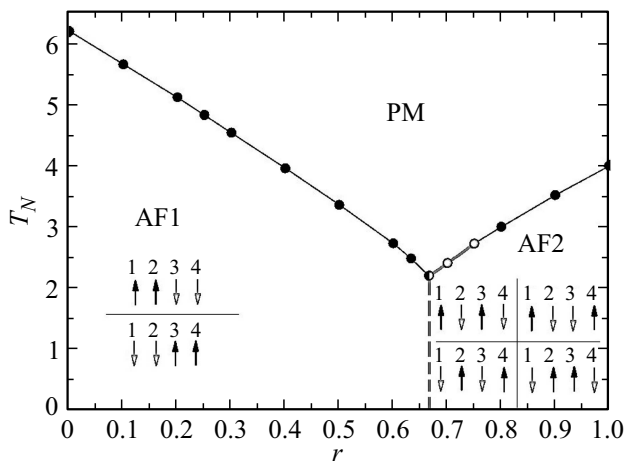


Рис. 24. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых соседей для модели Изинга на ОЦК-решетке.

Плотность состояний энергии $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L представлены на рис. 26. Из графика видно, что в данной системе

отсутствует сильное вырождение основного состояния. Это говорит о том, что в исследуемой модели конкуренция обменного взаимодействия первых и вторых соседей не приводит к сильному вырождению основного состояния, в отличие от модели Изинга на квадратной решетке [108].

Температурная зависимость энтропии S приведена на рис. 27. На этом рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия системы стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 2$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия системы стремится к значению близкому к нулю. Такое поведение энтропии так же позволяет говорить о том, что в данной модели вырождение основного состояния отсутствует. Можно предположить, что конкуренция обменного взаимодействия в данной модели не приводит к появлению фрустраций.

Для анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК, полученных как на основе репличного алгоритма, так и алгоритма

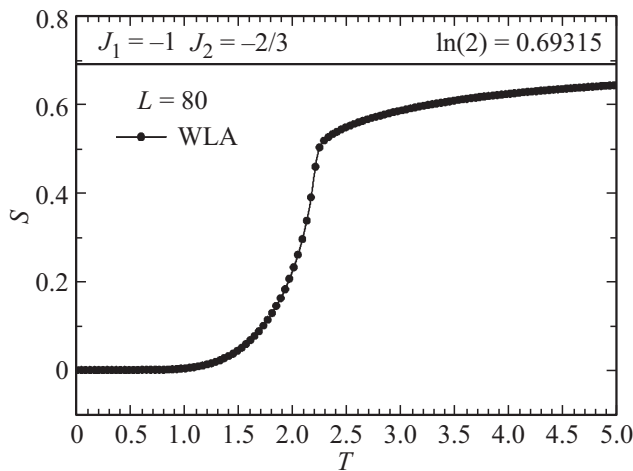


Рис. 27. Температурная зависимость энтропии.

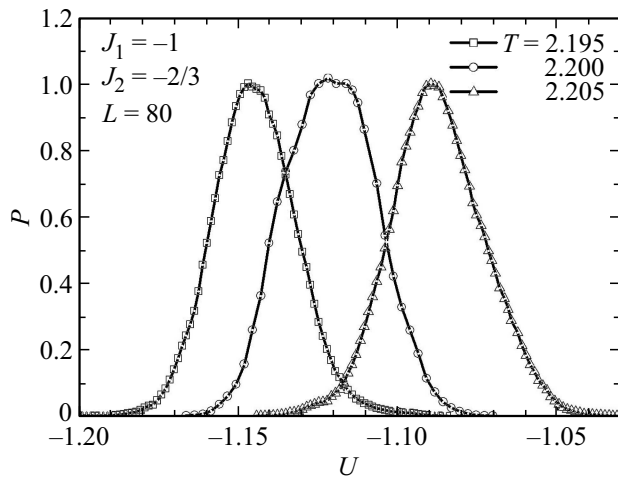


Рис. 28. Гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$.

Ванга–Ландау. Показано, что в интервалах $0.0 \leq r \leq 0.6$ и $0.8 \leq r \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода, что полностью согласуется с данными работы [105]. Более подробное исследование интервала $2/3 \leq r \leq 0.75$ показало, что для случая $r = 2/3$ наблюдается ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 28. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$. Графики построены вблизи критической температуры. Из рисунков видно, что в зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех значений температур наблюдаются один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода. Таким образом, результаты данного исследования показывают, что на фазовой диаграмме (рис. 24) наблюдается узкая область ($2/3 < r \leq 0.75$), в которой переход реализуется как ФП первого рода.

Анализируя данные можно предположить, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых соседей в

антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК-решетке приводит не к возникновению фрустрации, а к шестикратному вырождению основного состояния. В исследуемой модели при $r = 2/3$ наблюдается ФП второго рода [161–165]. Полученные данные могут быть использованы для описания конкретных антиферромагнитных материалов, имеющих ОЦК-решетку, таких как FeCr [166], FeAl, FeCo [167] и ряда других, приведенных в работе [168].

5. Модели Изинга с фрустрациями в магнитном поле

5.1. Модель Изинга на треугольной решетке в магнитном поле

В двумерной антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке, приложение внешнего магнитного поля стабилизирует спиновое состояние, и в системе происходит ФП [136]. В отличие от двумерного случая, трехмерная антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке до сих пор мало изучена. Данная модель позволяет описать целый ряд различных систем, включая искусственные дипольные магниты [169], соединения, в которых электрически заряженные гантели действуют как изинговские степени свободы [170], фрустрированные кулоновские жидкости [171] и др.

Многие физические свойства фрустрированных систем могут зависеть от внешних факторов, например, от магнитного поля. Поэтому исследование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле позволяет получить ответ на ряд вопросов, связанных с влиянием магнитного поля на ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

В данном разделе приводятся результаты исследований ФП в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле, которая описывается гамильтонианом

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - h \sum_i S_i^z. \quad (26)$$

Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси z , h — внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z . Расчёты проводились для систем с ПГУ и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12-48$.

На рис. 29 представлены температурные зависимости теплоемкости, полученные для системы с линейными размерами $L = 36$ при различных значениях величины магнитного поля h (здесь и далее магнитное поле указывается в единицах $k_B T$). На зависимостях теплоемкости от температуры в интервале $0 \leq h \leq 6$ вблизи критической температуры наблюдается хорошо выраженный максимум. Этот максимум смещается в сторону низких температур с увеличением величины магнитного поля. Происходит конкуренция внутреннего молекулярного

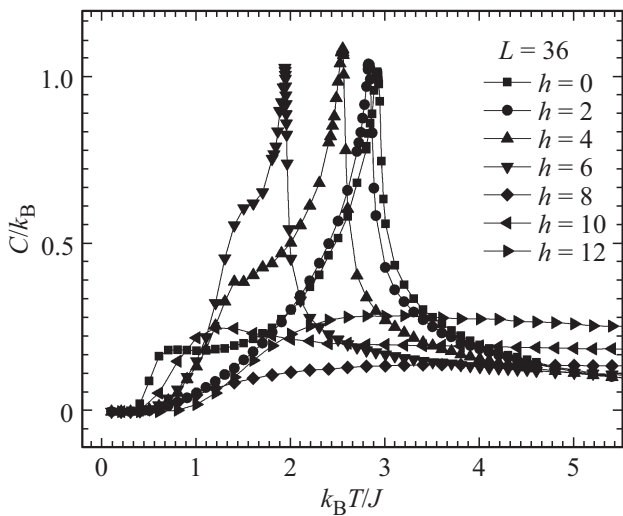


Рис. 29. Температурные зависимости теплоемкости для различных значений магнитного поля h .

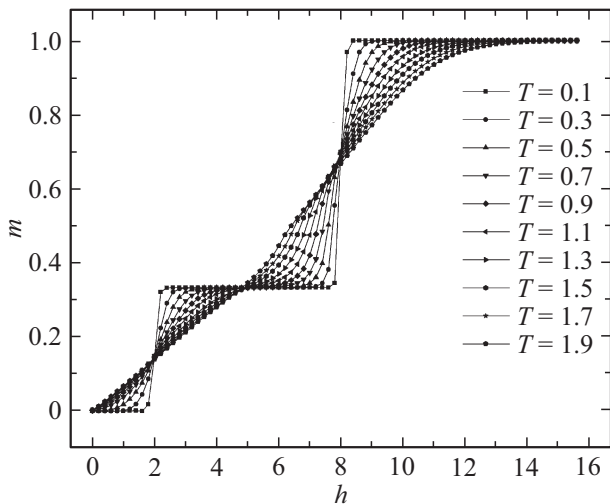


Рис. 30. Зависимости намагниченности от величины магнитного поля для разных значений температур.

поля, которая выстраивает в системе антиферромагнитное упорядочение и внешнего магнитного поля, которая выстраивает систему вдоль поля. В следствии этого, с увеличением внешнего магнитного поля, ФП в системе происходит при более низких температурах. В низкотемпературной области наблюдается наличие небольшого второго максимума. Заметим, что двойные пики связаны с так называемой промежуточной, частично разупорядоченной антиферромагнитной фазой. Из графиков видно, что в интервале $6 < h \leq 12$ максимумы теплоемкости становятся более плавными или вовсе исчезают. Это обусловлено тем, что магнитное поле полностью подавляет флуктуации системы и ФП в системе размывается.

На рис. 30 приведен график зависимости намагниченности от магнитного поля для разных значений температур. На рисунке наблюдаем плато намагниченности,

равное одной трети намагниченности насыщения. При включении внешнего магнитного поля можно представить основное состояние, обладающее дальним порядком. В этом состоянии спины двух подрешеток выстроены по полю, а спины третьей подрешетки направлены против направления магнитного поля. Это и приводит к возникновению плато намагниченности равная $1/3$ намагниченности насыщения. С увеличением температуры, плато постепенно исчезает, и мы наблюдаем плавный рост намагниченности до насыщения. Это объясняется температурными флуктуациями спинов.

На рис. 31 приведены температурные зависимости энтропии S при разных значениях магнитного поля h . Согласно теоретическим предсказаниям, энтропия для рассматриваемой системы должна стремиться к $\ln 2$ с ростом температуры. При низких температурах энтропия для нефрустрированных систем стремится к нулю, а для систем с фрустрациями принимает отличное от нуля значение. Из рисунка видно, что энтропия при высоких температурах стремится к $\ln 2$. При низких температурах энтропия стремится к отличному от нуля значениям. С увеличением h наблюдается рост величины к которому стремится энтропия при низких температурах. Такое поведение характерно для спиновых систем с фрустрациями. Это позволяет говорить, что при рассмотренных значениях магнитного поля в данной модели наблюдаются эффекты фрустрации. Для более высоких полей энтропия при низких температурах стремится к нулю, а в высокотемпературной области стремится к $\ln 2$. Можно утверждать, что при больших значениях магнитного поля в данной модели отсутствует вырождение основного состояния и система приходит в упорядоченное состояние.

Для изучения рода ФП нами использовался гистограммный метод анализа данных метода МК. Результаты нашей работы показывают, что ФП для значений поля в

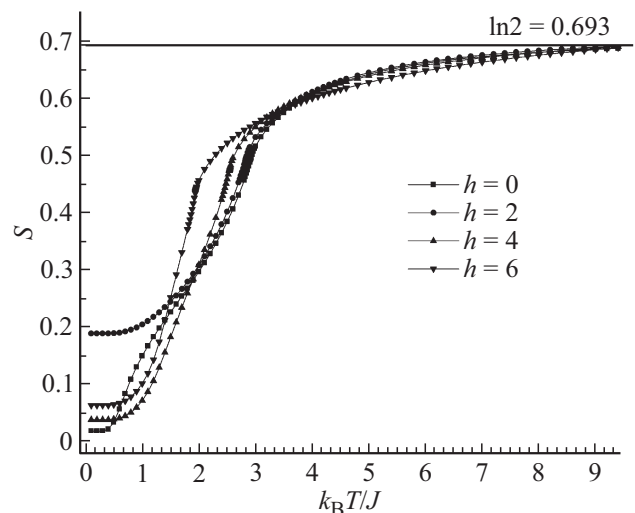


Рис. 31. Температурные зависимости энтропии S для различных значений магнитного поля h .

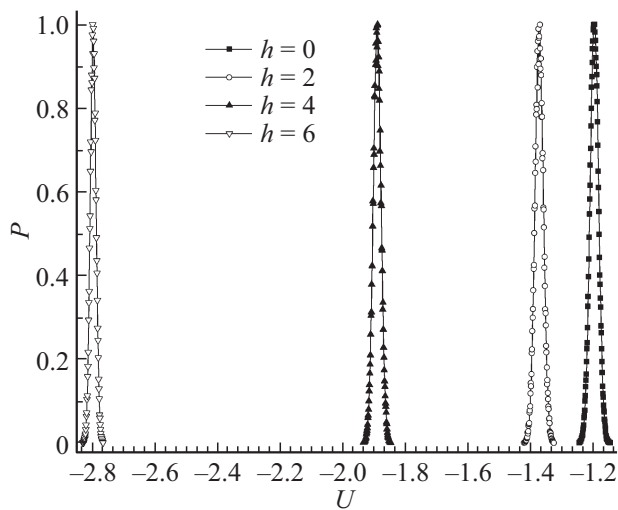


Рис. 32. Гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 36$ при $h = 0, 2, 4, 6$.

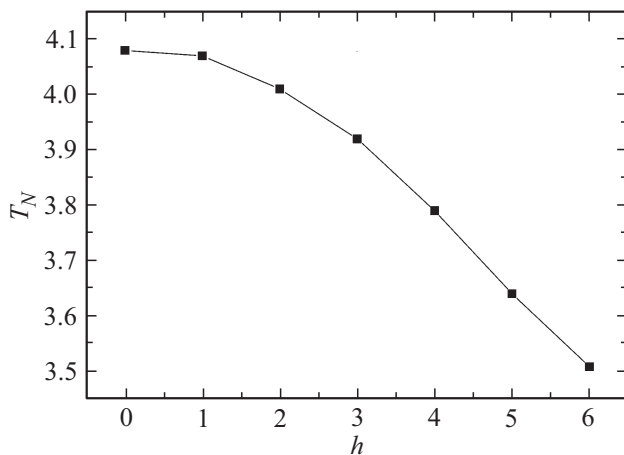


Рис. 33. Зависимость критической температуры от величины магнитного поля h для модели Изинга на ОЦК-решетке.

интервале $0 \leq h \leq 6$ являются переходами второго рода. Это продемонстрировано на рис. 32, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 36$ при $h = 0, 2, 4$ и 6 . На графиках видно, что в зависимости вероятности от энергии наблюдается один хорошо выраженный максимум. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует в пользу ФП второго рода [172–175].

5.2. Модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке в магнитном поле

В этом разделе нами будет рассмотрено влияние магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга

на ОЦК-решетке с учетом взаимодействий первых и вторых соседей.

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК-решетке с учетом взаимодействия первых и вторых соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) - h \sum_{\langle i \rangle} S_i^z, \quad (27)$$

где J_1 и J_2 — константы обменного антиферромагнитного взаимодействия первых ($J_1 < 0$) и вторых ($J_2 < 0$) соседей, h — величина магнитного поля. Магнитное поле направлено вдоль оси z . С использованием репличного алгоритма метода МК проводились расчеты для систем с ПГУ и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 18-90$.

Гистограммный анализ данных метода МК, показывает, что на гистограммах распределения энергии для всех значений поля в интервале $0.0 \leq h \leq 6.0$ наблюдается один максимум. Это говорит о том, что в системе реализуется ФП второго рода.

На рис. 33 представлена зависимость критической температуры T_N от величины магнитного поля h . Показано, что с увеличением величины магнитного поля в интервале $0.0 \leq h \leq 6.0$ температура T_N уменьшается. В рассмотренном интервале значений магнитного поля переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную осуществляется как ФП второго рода [176,177]. В работе [178] показано, что в интервале значений магнитного поля $0.0 \leq h \leq 10.0$ происходит ФП второго рода, а в интервале $11.0 \leq h \leq 13.0$ наблюдается ФП первого рода. Обнаружено, что сильное магнитное поле ($h \geq 14.0$) приводит к подавлению ФП.

6. Заключение

Представленные в настоящей работе данные о влиянии фрустраций на фазовые переходы, критическое поведение и термодинамические свойства моделей Изинга свидетельствуют о формировании чрезвычайно богатой и разнообразной картины их поведения. Возникновение фрустрированного состояния независимо от причины его формирования, то ли из-за геометрии решетки, то ли из-за конкурирующих взаимодействий может кардинально повлиять на фазовые переходы и критическое поведение. При этом может измениться и род фазового перехода, и класс универсальности критического поведения, а иногда может наблюдаться и неуниверсальное критическое поведение. Особенности поведения фрустрированных спиновых систем во многом зависят от соотношения сил конкурирующих обменных взаимодействий, от типа решетки и от размерности пространства. Одновременное влияние всех этих факторов приводит к тому что фазовые диаграммы таких систем становятся чрезвычайно разнообразными.

Финансирование работы

Работа выполнена при частичной поддержке научной программы НЦФМ (проект „Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях“).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] W. Lenz. *Z. Phys.* **21**, 613 (1920).
- [2] E. Ising. *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
- [3] L. Onsager. *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [4] T.D. Lee, C.N. Yang. *Phys. Rev.* **87**, 410 (1952).
- [5] J.C. Wheeler. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **28**, 411 (1977).
- [6] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths. *Phys. Rev. A* **4**, 1071 (1971).
- [7] C.J. Thompson. *Biopolymers* **6**, 1101 (1968).
- [8] S. Torquatto. *Phys. Biol.* **8**, 015017 (2011).
- [9] E. Alvarez-Lacalle, B. Echebarria, J. Spalding, Y. Shiferaw. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 108101 (2015).
- [10] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. *Phys. Rev. B* **50**, 6854 (1994-II).
- [11] K. Binder, E. Luijten. *Phys. Rep.* **344**, 179 (2001).
- [12] D.P. Landau. *Physica A* **205**, 41 (1994).
- [13] И.П. Белоборов, Р.С. Гехт, В.А. Игначенко. *ЖЭТФ* **84**, 1097 (1983).
- [14] D. Loison, A.I. Sokolov, B. Delamotte, S.A. Antonenko, K.D. Schotte, H.T. Diep. *Письма в ЖЭТФ* **72**, 487 (2000). [*JETP Lett.* **72**, 337 (2000)].
- [15] J. Snyder, J.S. Slusky, R.J. Cava, P. Schiffer. *Nature* **413**, 48 (2001).
- [16] J.S. Gardner, A. Keren, G. Ehlers, C. Stock, Eva Segal, J.M. Roper, B. Fåk, M.B. Stone, P.R. Hammar, D.H. Reich, B.D. Gaulin. *Phys. Rev. B* **68**, 180401 (2003).
- [17] G. Möller, R. Moessner. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237202 (2006).
- [18] F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. *JMMM* **324**, 3418 (2012).
- [19] С.Е. Коршунов. *УФН* **176**, 233 (2006).
- [20] Р. Бэкстер. *Точно решаемые модели в статистической механике* / Под ред. А.М. Бродского. Мир, М. (1985). 486 с.
- [21] L.D. Fosdick. *Bull. Am. Phys. Soc.* **2**, 239 (1957).
- [22] D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **13**, 2997 (1976).
- [23] D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **14**, 255 (1976).
- [24] D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **16**, 4164 (1977).
- [25] K. Binder. *Phys. Status Solidi B* **46**, 567 (1971).
- [26] L. Hua, J.W. Tucker. *JMMM* **140–144**, 1509 (1995).
- [27] D. Farsal, M. Snina, M. Bennai, M. Badia. *J. Supercond. Nov. Magn.* **30**, 2187 (2017).
- [28] D. Farsal, M. Bennai, M. Badia. *SPIN* **8**, 1850010 (2018).
- [29] T. Balcerzak, K. Szałowski, A. Bobák, M. Žukovič. *Phys. Rev. E* **98**, 022123 (2018).
- [30] Y. Aoyama, W. Chen, M. Tanaka. *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 272 (1997).
- [31] M.E.J. Newman, G.T. Barkema. *Phys. Rev. E* **53**, 393 (1996).
- [32] E.T. Gawliński, S. Kumar, M. Grant, J.D. Gunton, K. Kaski. *Phys. Rev. B* **32**, 1575 (1985).
- [33] C. Dekker, B.J. Dikken, A.F.M. Arts. *Solid State Commun.* **54**, 887 (1985).
- [34] J.D. Shore, G.M. Thurston. *Phys. Rev. E* **92**, 062123 (2015).
- [35] H.-J. Wu, W. Wang, B.-C. Li, Q. Li, J.-H. Xu, F. Wang. *J. Phys. Chem. Solids* **136**, 109174 (2020).
- [36] O. Nagai, Y. Yamada, K. Nishino, Y. Miyatake. *Phys. Rev. B* **35**, 3425 (1987).
- [37] R. Bidaux, N. Voccara. *Phys. Rev. B* **34**, 4881 (1986).
- [38] M. Danino. *Solid State Commun.* **52**, 885 (1984).
- [39] S.N. Coppersmith. *Phys. Rev. B* **32**, 1594 (1985).
- [40] J.D. Kimel, S. Black, P. Carter, Y.L. Wang. *Phys. Rev. B* **35**, 3347 (1987).
- [41] С.В. Белим, И.Б. Ларионов. *Вестн. Московск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия* **4**, 58 (2018).
- [42] T. Arh, B. Sana, M. Pregelj, P. Khuntia, Z. Jagličić, M.D. Le, P.K. Biswas, P. Manuel, L. Mangin-Thro, A. Ozarowski, A. Zorko. *Nature Mater.* **21**, 416 (2022).
- [43] K. Dutta, D. Talukdar. *JMMM* **556**, 169344 (2022).
- [44] Y. Shokef, A. Souslov, T.C. Lubensky. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. (PNAS)* **108**, 11804 (2011).
- [45] W. Kerler, P. Rehberg. *Phys. Rev. B* **49**, 9688 (1994).
- [46] А.К. Муртазаев, И.К. Камиллов, М.К. Рамазанов. *ФТТ* **47**, 1125 (2005).
- [47] M. Schmidt, G.L. Kohlrausch, F.M. Zimmer. *Physica A* **596**, 127126 (2022).
- [48] E. Jurčičinová, M. Jurčičin. *Physica A* **603**, 127731 (2022).
- [49] R.M. Liu, W.Z. Zhuo, X.B. Lu, X.S. Gao, M.H. Qin, J.-M. Liu, S. Dong. *Phys. Rev. E* **93**, 032114 (2016).
- [50] R. Moessner, S.L. Sondhi. *Phys. Rev. B* **63**, 224401 (2001).
- [51] A.G. Cavaliere, A. Pelissetto. *J. Phys. A* **52**, 174002 (2019).
- [52] Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов. *ФТТ* **63**, 1350 (2021).
- [53] E. Jurčičinová, M. Jurčičin. *Phys. Rev. E* **104**, 044121 (2021).
- [54] Е.С. Цуварев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. *ЖЭТФ* **158**, 504 (2020).
- [55] J. Wu, D.C. Mattis. *Phys. Rev. B* **67**, 224414 (2003).
- [56] T. Yoshioka, A. Koga, N. Kawakami. *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1805 (2004).
- [57] N. De La Espriella, G.M. Buendía, J.C. Madera. *J. Phys. Commun.* **2**, 025006 (2018).
- [58] H. Bouda, L. Bahmad, R. Masrour, A. Benyoussef. *J. Supercond. Nov. Magn.* **32**, 1837 (2019).
- [59] A. Jabar, R. Masrour. *Physica A* **515**, 270 (2019).
- [60] R. Masrour, A. Jabar. *Physica A* **539**, 122878 (2020).
- [61] E. Jurčičinová, M. Jurčičin. *Phys. Rev. B* **101**, 214443 (2020).
- [62] E. Jurčičinová, M. Jurčičin. *Physica A* **583**, 126338 (2021).
- [63] E. Jurčičinová, M. Jurčičin. *Phys. Lett. A* **388**, 127043 (2021).
- [64] С.В. Белим, И.Б. Ларионов, Р.В. Солонецкий. *Физика металлов и металловедение* **117**, 1115 (2016).
- [65] P.F. Godoy, M. Schmidt, M.F. Zimmer. *Phys. Lett. A* **384**, 126687 (2020).
- [66] H. Li, L.-P. Yang. *Phys. Rev. E* **104**, 024118 (2021).
- [67] A.O. Sorokin. *Physica A* **602**, 127621 (2022).
- [68] Y. Hu, P. Charbonneau. *Phys. Rev. B* **104**, 144429 (2021).
- [69] A.V. Zarubin, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. *JMMM* **514**, 167144 (2020).
- [70] F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. *Phys. Met. Metallogr.* **120**, 1359 (2019).
- [71] A.I. Proshkin, F.A. Kassan-Ogly. *Phys. Met. Metallogr.* **120**, 1366 (2019).
- [72] G. Toulouse. *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).

- [73] В.С. Доценко. УФН **163**, 1 (1993).
- [74] A.P. Ramirez. Annu. Rev. Mater. Sci. **24**, 453 (1994).
- [75] В.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [76] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
- [77] К. Биндер. Методы Монте-Карло в статистической физике / Под. ред. Г.И. Марчука, Г.А. Михайлова. Мир, М. (1982). 400 с.
- [78] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- [79] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2015 (2001).
- [80] M.N. Barber. J. Phys. A **12**, 679 (1979).
- [81] D.P. Landau, K. Binder. Phys. Rev. B **31**, 5946 (1985).
- [82] J.A. Plascak. Physica A **183**, 563 (1992).
- [83] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [84] M.P. Nightingale. Phys. Lett. A **59**, 486 (1977).
- [85] R. H. Swendsen, S. Krinsky. Phys. Rev. Lett. **43**, 177 (1979).
- [86] K. Binder, D.P. Landau. Phys. Rev. B **21**, 1941 (1980).
- [87] K. Minami, M. Suzuki. J. Phys. A **27**, 7301 (1994).
- [88] J.L. Morán-López, F. Aguilera-Granja, J.M. Sanchez. Phys. Rev. B **48**, 3519 (1993).
- [89] J.L. Morán-López, F. Aguilera-Granja, J.M. Sanchez. J. Phys.: Condens. Matter **6**, 9759 (1994).
- [90] E. Lopez-Sandoval, J.L. Morán-López, F. Aguilera-Granja. Solid State Commun. **112**, 437 (1999).
- [91] C. Buzano, M. Pretti. Phys. Rev. B **56**, 636 (1997).
- [92] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев, ФНТ **37**, 1258 (2011)
- [93] K. Binder, J.-Sh. Wang. J. Status Phys. **55**, 87 (1989).
- [94] Junqi Yin, D.P. Landau. Phys. Rev. E **80**, 051117 (2009).
- [95] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995).
- [96] A.R. Anjos, J.R. Viana, J.R. Sousa. Phys. Lett. A **372**, 1180 (2008).
- [97] A. Kalz, A. Honecker. Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
- [98] S. Jin, A. Sen, A.W. Sandvik. Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).
- [99] A.E. Ferdinand, M.E. Fisher. Phys. Rev. **185**, 832 (1969).
- [100] M.E. Fisher, M.N. Barber. Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
- [101] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [102] D. Stauffer, A. Aharony. Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, London (1994).
- [103] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов. ФНТ **32**, 323 (2006).
- [104] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. Phys. Rev. B **76**, 174421 (2007).
- [105] Ch. Holm, W. Janke. Phys. Rev. B **48**, 936 (1993).
- [106] A. Malakis, P. Kalozoumis, N. Tyraskis. Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).
- [107] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оgly, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
- [108] Ф.А. Кассан-Оgly, А.К. Муртазаев, А.К. Zhuravlev, М.К. Ramazanov, A.I. Proshkin. JMMM **384**, 247 (2015).
- [109] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. Physica B: Condens. Matter **476**, 1 (2015).
- [110] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Magomedov. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
- [111] P. Chandra, P. Coleman, I. Ritchey. J. de Physique **33**, 591 (1993).
- [112] J.T. Chalker, P.C.W. Holdsworth, E.F. Shender. Phys. Rev. Lett. **68**, 855 (1992).
- [113] A.B. Harris, C. Kallin, A.J. Berlinsky. Phys. Rev. B **45**, 2899 (1992).
- [114] P.C. Гехт, И.Н. Бондаренко. ЖЭТФ **113**, 2209 (1998).
- [115] M. Wolf, K.D. Schotte. J. Phys. A **21**, 2195 (1988).
- [116] R.S. Gekht, V.I. Ponomarev. Phase Transitions **20**, 27 (1990).
- [117] M. Stahn, R.E. Lechner, H. Dachs, H.E. Jacobs. J. Phys. C **16**, 5073 (1983).
- [118] M.G. Townsend, G. Longworth, E. Roudaut. Phys. Rev. B **33**, 4919 (1986).
- [119] T. Matsuo, H. Suga. Rev. Inorg. Chem. **3**, 371 (1981).
- [120] M. Takano, T. Shinjo, T. Takada. J. Phys. Soc. Jpn. **30**, 1049 (1971).
- [121] T. Takagi, M. Mekata. J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 3943 (1993).
- [122] М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).
- [123] М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev, М.А. Magomedov, М.К. Badiev. Phase Transitions **91**, 610 (2018).
- [124] A.R. Anjos, J.R. Viana, J.R. de Sousa, J.A. Plascak. Phys. Rev. E **76**, 022103 (2007).
- [125] D.R.O. Salmon, N. Crokidakis, A.M. Neto, T.I. Padilha, J.R. Viana, J.R. de Sousa. Int. J. Mod. Phys. B **27**, 1350162 (2013).
- [126] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
- [127] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
- [128] J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin. Phys. Rev. B **21**, 3976 (1980).
- [129] H.T. Diep, P. Lallemand, O. Nagai. J. Phys. C **18**, 1067 (1985).
- [130] L.W. Bernardi, K. Hukushima, H. Takayama. J. Phys. A **32**, 1787 (1999).
- [131] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **59**, 1797 (2017).
- [132] М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev. Phase Transitions **91**, 83 (2018).
- [133] G.H. Wannier. Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
- [134] G.F. Newell. Phys. Rev. **79**, 876 (1950).
- [135] R.M.F. Houtapel. Physica **16**, 425 (1950).
- [136] J. Hose, K. Kadanoff, S. Kirkpatrick, D.R. Nelson. Physica **16**, 1217 (1977).
- [137] D. Blankschtein, M. Ma, A. N. Berker, G.S. Grest, C.M. Soukoulis. Phys. Rev. B **29**, 5250 (1984).
- [138] G.A. Baker, Jr., B.G. Nickel, D.I. Meiron. Phys. Rev. B **17**, 1365 (1978).
- [139] O. Heinonen, R.G. Petschek. Phys. Rev. B **40**, 9052 (1989).
- [140] M.L. Plumer, A. Mailhot, R. Ducharme, A. Caille, H.T. Diep. Phys. Rev. B **47**, 312 (1993).
- [141] A. Bunker, B.D. Gaulin, C. Kallin. Phys. Rev. B **48**, 15 861 (1993).
- [142] N. Todoroki, S. Miyashita. J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 412 (2004).
- [143] H. Shiba. Prog. Teor. Phys. **64**, 466 (1980).
- [144] M. Kaburagi, T. Tonegawa, J. Kanamori. J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 3857 (1982).
- [145] P. Matsubara, S. Ikeda. Phys. Rev. B **28**, 4064 (1983).
- [146] P. Matsubara, S. Inawashira. J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4373 (1984).
- [147] H. Yoshizawa, K. Hirakawa. J. Phys. Soc. Jpn. **46**, 448 (1980).
- [148] E. Rastelli, S. Regina, A. Tassi. Phys. Rev. **71**, 174406 (2005).
- [149] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. Physica A **507**, 210 (2018).
- [150] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

- [151] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФНТ **45**, 1493 (2019).
- [152] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФТТ **61**, 1898 (2019).
- [153] М.К. Бадиев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
- [154] P.H. Lundow, K. Markstrom, A. Rosengren. Phil. Mag. **89**, 2042 (2009).
- [155] P. Butera, M. Comi. Phys. Rev. B **65**, 144431 (2002).
- [156] P. Butera, M. Comi. Phys. Rev. B **72**, 014442 (2005).
- [157] M. Plischke, J. Oitmaa. Phys. Rev. B **19**, 487 (1979).
- [158] J.R. Banavar, D. Jasnow, D.P. Landau. Phys. Rev. B **20**, 3820 (1979).
- [159] M.J. Velgakis, M. Ferer. Phys. Rev. B **27**, 401 (1983).
- [160] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
- [161] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев. ФТТ **59**, 1082 (2017).
- [162] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, Д.Р. Курбанова. ФТТ **60**, 1798 (2018).
- [163] А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
- [164] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova, M.A. Magomedov, K.Sh. Murtazaev. Mater.Lett. **236**, 669 (2019).
- [165] Y.-H. Song, Y. Kim, N. Li, B.-N. Lu, R. He, D. Lee. Phys. Rev. C **104**, 044304 (2021).
- [166] M.Yu. Lavrentiev, D. Nguyen-Manh, S.L. Dudarev. Phys. Rev. B **81**, 184202 (2010).
- [167] R. Leidl, H.W. Diehl. Phys. Rev. B **57**, 1908 (1998).
- [168] P. Villars, K. Cenzual, R. Gladyshevskii. Handbook of inorganic substances. Berlin (2017). P. 1955.
- [169] E. Mengotti, L.J. Heyderman, A. Bisig, A. Fraile Rodríguez, L. Le Guyader, F. Nolting, H.B. Braun. J. Appl. Phys. **105**, 113113 (2009).
- [170] A. Smerald, F. Mila. Phys. Rev. Lett. **115**, 147202 (2015).
- [171] S. Mahmoudian, L. Rademaker, A. Ralko, S. Fratini, V. Dobrosavljevic. Phys. Rev. Lett. **115**, 025701 (2015).
- [172] А.К. Муртазаев, М.К. Бадиев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. Physica A **555**, 124530 (2020).
- [173] М.К. Бадиев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. ФНТ **46**, 824 (2020).
- [174] A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica E **142**, 115320 (2022).
- [175] М.К. Бадиев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **161**, 753 (2022).
- [176] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, К.Ш. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев. ФТТ **62**, 229 (2020).
- [177] K.S. Murtazaev, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov, A.A. Murtazaeva. Low Temperature Phys. **47**, 515 (2021).
- [178] K.S. Murtazaev, M.A. Magomedov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov. Physica E **148**, 115646 (2023).

Редактор Ю.Э. Китаев