

*На правах рукописи*

**БАДИЕВ МАГОМЕДЗАГИР КУРБАНОВИЧ**

**ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ФРУСТРИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА  
МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО**

**01.04.07 – физика конденсированного состояния**

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: Член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор  
**Муртазаев Акай Курбанович**

Махачкала, 2012

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ.....</b>	<b>4</b>
<b>ГЛАВА I. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО.</b>	
§ 1.1. Классический метод Монте-Карло.....	24
§ 1.2. Численное моделирование. Эвристические модели.....	31
§ 1.3. Стандартный алгоритм метода Монте-Карло.....	37
§ 1.4. Репличный алгоритм метода Монте-Карло.....	39
§ 1.5. Граничные условия.....	44
§ 1.6. Анализ ошибок в методе Монте-Карло.....	46
<b>ГЛАВА II. ФРУСТРИРОВАННЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ.</b>	
§ 2.1. Атомный порядок и беспорядок.....	54
§ 2.2. Конкуренция обменных взаимодействий, фрустрация.....	57
§ 2.3. Критические свойства антиферромагнетиков на треугольной решетке.....	63
§ 2.4. Основные положения теории конечно – размерного скейлинга.....	67
§ 2.. Фрустрированная модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием.....	73
<b>ГЛАВА III. МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА СЛОИСТОЙ         ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ.</b>	
§ 3.1. Критическое поведение фрустрированной модели Гейзенберга с различными типами межплоскостного обменного взаимодействия.....	94

§ 3.2. Анализ результатов численного эксперимента.....	107
§ 3.3. Критическое поведение фрустрированной модели Гейзенберга с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.....	118
§ 3.4. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей.....	134
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>139</b>
<b>ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>143</b>

## ***ВВЕДЕНИЕ.***

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в фрустрированных спиновых системах – одна из сложных и интересных задач статистической физики. Успехи, достигнутые в последние годы в понимании ФП и КЯ в фрустрированных системах (ФС), в значительной степени связаны с применением методов вычислительной физики. Это обусловлено тем, что большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования таких систем сталкивается с серьезными трудностями при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения таких систем.

В последние годы достигнут значительный прогресс в понимании проблемы фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ). Тем не менее, количественное описание ФП и КЯ в различных решеточных спиновых системах до сих пор остается одной из центральных задач современной теории конденсированного состояния. В построении теории фазовых переходов наиболее продуктивными оказались методы ренормализационной группы и  $\varepsilon$ -разложения, а также применение гипотезы подобия (скейлинг), основы которой были заложены в 60-х годах [1-5]. На их основе было получено большинство важнейших результатов современной теории ФП и КЯ. Установлены основные закономерности, наблюдающиеся в критической области, получены соотношения между критическими индексами (КИ) и критическими амплитудами (КА), построены уравнения состояния, рассчитаны значения КИ и КА. Идеи лежащие в основе всех этих предположений значительно обогатили наше понимание природы критических явлений. Тем не менее, строгой и последовательной микроскопической теории фазовых переходов второго рода и критических явлений на сегодняшний день не существует [6].

Существенный вклад в строгую количественную теорию критических явлений в решеточных спиновых системах также внесли методы высоко- и низкотемпературных разложений [5, 7].

На сегодняшний день установлено, что критические индексы не зависят от величины спина и деталей микроскопического гамильтониана, но сильно зависят от размерности  $d$  рассматриваемой системы и числа степеней свободы параметра порядка  $n$ . Эти закономерности позволили сформулировать гипотезу универсальности для статических критических явлений. В наиболее общем виде принцип универсальности может быть сформулирован следующим образом.

Критическое поведение системы зависит от:

1. размерности пространства;
2. числа степеней свободы параметра порядка;
3. симметрии гамильтониана;
4. радиуса характерного взаимодействия.

Вследствие чего, в пределах одного класса универсальности для всех систем, претерпевающих фазовый переход второго рода, критические индексы являются одинаковыми. Таким образом, в один и тот же класс универсальности попадают столь непохожие на первый взгляд системы, как жидкости, магнетики, сверхпроводники, сегнетоэлектрики и другие. В то же время следует отметить, что класс универсальности фрустрированных систем (ФС) может зависеть не только от этих параметров [8-11].

Важную роль в построении общей микроскопической теории фазовых переходов играют точные аналитические решения, которые удалось получить лишь для весьма ограниченного числа решеточных моделей. В 1925 году Изинг нашел решение для случая одномерной цепочки (в цепочке атомов фазовый переход происходит при  $T=0$ ) [12]. В 1944 году Онзагер точно разрешил двухмерную проблему модели Изинга в

нулевом внешнем поле [13] и доказал существование фазового перехода. В 1952 году Берлин и Кац сформулировали и строго рассчитали так называемую сферическую модель [14]. Далее, наиболее интересным результатом было получение Либом [15, 16] строгого решения для модели типа льда (шести вершинной модели). Имеют точное решение и некоторые другие модели [17].

Несмотря на значительные успехи, создание последовательной теории фазовых переходов второго рода до сих пор остается одной из актуальных проблем физики конденсированного состояния [6, 18].

В основном при описании критических явлений в решеточных системах наиболее часто используются модели первого приближения. К таким моделям относятся: классическая модель Изинга, Гейзенберга, XY-модель, модель Поттса и т.д. На их основе, с помощью вышеупомянутых теоретических методов, 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) успешно исследуется и критическая область с вычислением значений критических индексов (КИ) и критических амплитуд (КА), при этом достигаемая точность не только не уступает, но и зачастую превосходит лучшие результаты других методов [9,19-23].

Увеличению точности методов вычислительной физики (ВФ) способствуют[24-30]:

1. увеличение вычислительных мощностей современных ЭВМ;
2. разработка мощных высокоэффективных алгоритмов;
3. усовершенствование методов анализа данных;

4. использование теории конечно-размерного скейлинга (КРС) для расчета критических параметров.

Центр тяжести теоретических исследований переместился к изучению более реалистичных моделей 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 [8, 31, 32].

Особый интерес представляют исследования спиновых стекол и фрустрированных спиновых систем. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования установили, что ФС во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие отражается, прежде всего, в богатом разнообразии фаз и фазовых переходов, что обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью фрустрированных систем к различного рода возмущающим взаимодействиям [33].

Вопрос о существовании нового кирального класса универсальности критического поведения на многих решетках и определение рода фазового перехода при изучении фрустрированных систем до сих пор является дискуссионным. Многие важные физические свойства фрустрированных систем сильно зависят от геометрии решетки (от степени фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, и этот вопрос все еще недостаточно изучен [8-11].

Большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования таких систем сталкиваются с серьезными трудностями при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения таких систем [18, 34]. Следовательно, строгое исследование трехмерных

микроскопических гамильтонианов сложных систем методами современной теоретической физики – задача чрезвычайно сложная.

Эти и некоторые другие причины привели к тому, что фазовые переходы и критические явления интенсивно исследуются методами вычислительной физики (ВФ) – методами МК и молекулярной динамики (МД) [19-21, 35-38], которые позволяют успешно исследовать критические свойства систем со сложными реалистичными гамильтонианами в широком диапазоне температур и других внешних параметров. Данные, получаемые с помощью методов ВФ, с одной стороны, можно рассматривать как «экспериментальные» и сравнивать их с различными аналитическими приближениями, а с другой стороны – как “теоретические“ и сравнивать их с соответствующими экспериментами.

Одним из преимуществ методов численного эксперимента (ЧЭ) является то, что их применение не связано с малостью тех или иных параметров или другими трудностями, характерными для аналитических подходов. Погрешность контролируется в рамках самого метода. Анализ информации, полученная на основе этих методов, позволяет судить о термодинамических и кинетических свойствах системы, об ее структуре, дает совокупность характерных конфигураций или отрезок фазовой траектории. ЧЭ стал надежным и самостоятельным инструментом в исследовании молекулярных систем наряду с физическим экспериментом и аналитическими подходами [39-41].

Использование методов вычислительной физики требует создания довольно больших и сложных программ для ЭВМ. Почти все программы весьма специфичны, требуют от программиста большого опыта и внимательности и, как правило, не могут быть использованы для решения различных задач. Тем не менее, в настоящее время методам вычислительной физики уделяется значительное внимание. Об этом свидетельствует разработка специализированных ЭВМ и процессоров,



строго ориентированных на эти методы и решение конкретных задач статистической механики и молекулярной физики [35].

В данной работе рассматриваются некоторые вопросы теории статических критических явлений и фазовых переходов в фрустрированных спиновых системах. Объектом исследования является полностью фрустрированная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. Рассматриваемая модель сталкивается с серьезными трудностями при исследовании традиционными теоретическими методами, особенно в области фазового перехода. В рамках этой работы методами МК проведены исследования статических критических свойств полностью фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием, с изменением типа взаимодействия между плоскостями и с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Экспериментальные и теоретические данные, имеющиеся в литературе по критическим свойствам этой модели противоречивы и часто не согласуются между собой. Таким образом, исследование ФП и КЯ в этой модели целесообразно провести на основе методов ВФ [8-11, 18].

Интерес к этим моделям обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, при изучении ФС вопрос о существовании нового кирального класса универсальности на многих решетках, в частности, треугольных до сих пор является дискуссионным [9-11].

Во-вторых, многие важные физические свойства ФС сильно зависят от геометрии решетки (от степени фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, и этот вопрос все еще недостаточно полно изучен [18].

В-третьих, первые попытки исследования этих моделей предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и

используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

Так же до сих пор остается дискуссионным вопрос о роде фазового перехода в фрустрированных спиновых системах на треугольной решетке.

Фрустрированные спиновые системы являются довольно сложными объектами для исследования даже методами МК. Как известно, вблизи критической точки метод МК сталкивается с проблемой “критического замедления”. Кроме того, в ФС существует немаловажная проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Обычные методы МК плохо справляются с решением этой проблемы. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Для решения этой проблемы наиболее приспособленными и эффективными оказались репличные алгоритмы метода МК [42].

Поэтому нами на основе репличного алгоритма исследовано статическое критическое поведение  $3d$  фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием, антиферромагнитной модели Гейзенберга с изменением типа межплоскостного обменного взаимодействия и модели Гейзенберга на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей.

К настоящему моменту фрустрированные антиферромагнетики изучены достаточно хорошо, однако многие аспекты теории слоистых антиферромагнетиков с треугольной геометрией остаются невыясненными. Предлагаемая работа призвана частично восполнить эти пробелы.

Таким образом, исследование ФП и КЯ, в частности фрустрированных спиновых систем, исходя из трехмерных микроскопических гамильтонианов, является **важной и актуальной** проблемой современной статистической физики решеточных систем.

**Целью работы** является исследование статических критических свойств моделей фрустрированных спиновых систем репличными алгоритмами метода Монте-Карло. В процессе выполнения работы решались следующие основные задачи:

1. Разработка комплекса программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать статические критические свойства моделей с фрустрациями;
2. Исследование методом Монте-Карло статических критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием. Определение статических критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$ , и индекса радиуса корреляции  $\nu$  этой модели на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС);
3. Исследование критического поведения и зависимость критических индексов  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке от типа межплоскостного обменного взаимодействия;
4. Исследование статического критического поведения трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей;
5. Проверка справедливости теории конечно-размерного скейлинга для фрустрированных моделей.

#### **Практическая ценность работы.**

Полученные в диссертации результаты по исследованию статических критических свойств фрустрированных спиновых моделей представляют интерес для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической теории конденсированного состояния. Разработанный комплекс программ для ЭВМ формирует базу,

на основе которой возможны высокоточные исследования статических критических явлений в фрустрированных спиновых системах.

Использование репличного алгоритма метода МК для исследования моделей фрустрированных спиновых систем показало, что репличные алгоритмы являются ценным инструментом при исследовании ФС, позволяют определять с высокой степенью точности критические параметры системы и являются значительно более эффективными по сравнению с классическим алгоритмом (алгоритм Метрополиса). Эти алгоритмы успешно справляются с проблемой локальных энергетических минимумов, в решении которой другие алгоритмы метода МК (стандартный алгоритм Метрополиса, одно-кластерный алгоритм Вульфа) оказались малоэффективными.

Экспериментальные результаты данной работы используются для чтения спецкурсов: «Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло», «Компьютерное моделирование в физике», «Методы вычислительной физики в магнетизме», а часть программ для ЭВМ при выполнении лабораторных работ по указанным спецкурсам в Дагестанском государственном университете и в Дагестанском государственном педагогическом университете.

**Научную новизну и значимость** диссертации определяют **основные положения**, которые автор выносит на защиту:

1. Исследование критических свойств  $3d$  фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием. Расчитаны статические магнитные и киральные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  и индексы радиуса корреляции  $\nu$  и  $\nu_k$  этой модели. Показана принадлежность  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на

- треугольной решетке к новому классу универсальности критического поведения.
2. Исследование магнитных и киральных статических критических свойств  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга с различными типами межплоскостного обменного взаимодействия. Доказательство принадлежности  $3d$  фрустрированных моделей Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с ферромагнитным и антиферромагнитным межплоскостным взаимодействием к одному и тому же классу универсальности критического поведения.
  3. Результаты расчета магнитных и киральных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  и радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$   $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.
  4. Результаты исследования характера и особенностей фазовых переходов в  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей на основе высокоэффективного гистограмного метода МК.
  5. Разработка сложного комплекса программ для ЭВМ, основанный на использовании современных высокоэффективных алгоритмов, позволяющий проводить высокоточные исследования статических критических явлений в моделях фрустрированных спиновых систем.

#### **Апробация работы.**

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях, совещаниях, семинарах: 9-м международном симпозиуме «Упорядочение в металлах и сплавах» ОМА-9 (Ростов-на-Дону – пос.Лео, 2006); Международной конференции «Фазовые переходы, критические и

нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала: 2007; 10-м международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-10, v. II. Ростов-на-Дону - пос.Лоо: 2007; V всероссийская конференция по ФЭ – 2008 Махачкала 2008; VIII региональной школе-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике, физике и химии. Уфа 2008; 11-м международном симпозиуме «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-11 , г. Ростов-на-Дону - пос.Лоо: 2008; XXI-й международной конференции «Новое в магнетизме и магнитных материалах». Москва, 2009; Межрегиональной научно-технической конференции памяти профессора Валеева К.А. «Актуальные проблемы естественных и технических наук». Уфа, 2009; Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 7-10 сентября 2009; 12-мй международном симпозиуме «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-12. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 17-22 сентября 2009; V-й международной конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук». Томск, 2009; Региональной школе-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике, физике и химии. Уфа, 2009; Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2010; XXXIII Международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка-2010». Екатеринбург, 2010; IV Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism”: Nanospintronics EASTMAG-2010; 13-м международной симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-13. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2010; 14-м международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-14. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2011; Moscow International Symposium on Magnetism «MISM». Moscow, 2011; Международной конференции «Инноватика-2011». Махачкала, 2011.

### Публикации.

1. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Статическое критическое поведение трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием // ЖЭТФ. – 2007. Т.132, № 5, С.1152-1159.
2. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование фрустрированной модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием // Известия РАН. Серия физическая. – 2008. Т. 72, № 8, С. 1186-1189.
3. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Абуев Я.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга методом Монте-Карло // Вестник ДГУ. – 2008. № 6, С. 5-10.
4. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. Бадиев М.К. Исследование критических свойств трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами Монте-Карло // ФНТ. – 2009. Т.35, №7, С.663-669.
5. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование влияния фрустраций на критические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга // Радиотехника и Электроника. – 2009. Т.54, №2, С.202-207.
6. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методом Монте-Карло // Известия РАН. Серия физическая. – 2009. Т.73, №7, С.1059-1061.
7. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование фазовых переходов фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной

- решетке методами Монте-Карло // ФТТ. – 2010. Т.52, №8. С.1557-1562.
8. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Фрустрированной антиферромагнетик Гейзенберга на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. Т.74, №8, С.1189-1191.
  9. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке // Вестник ДНЦ – 2010. № 37, С. 5-10.
  10. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // ФНТ. – 2011. Т. 37, С. 1258-1263.
  11. Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., Men'shenin V.V., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Frustrations and phase transitions in Ising model on 2D lattices // Solid state phenomena. – 2011. V. 168-169. P. 435-438.
  12. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Компьютерное моделирование фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке // Известия РАН. Серия физ. – 2011. Т. 75, С. 1103-1105.
  13. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование фрустрированной модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием. // 9-й международный симпозиум «Упорядочение в металлах и сплавах» ОМА-9, в. II. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2006. – С.63-65.
  14. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критическое поведение и пространственный кроссовер в фрустрированной



- антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке // 10-й международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-10, v. II. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2007. – С.68-70.
15. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методом Монте – Карло. // 11-й международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» *ODPO* – 11, v. II. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2008. – С.298-300.
  16. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Фрустрированный антиферромагнетик Гейзенберга на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // 12-й международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» *ODPO*-12. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2009. v. II. С.52-54.
  17. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Компьютерное моделирование фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке // 13-й международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-13. Ростов-на-Дону - пос.Лоо, 2010. v. II. С.100-102.
  18. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критические свойства двумерной антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // 14-й международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-14. Ростов-на-Дону - пос.Лоо. 2011. v. II. С. 52-55.
  19. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. Бадиев М.К. Критическое поведение трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов XXI международной конференции «Новое в магнетизме и магнитных материалах». Москва, 2009. С.761-763.

20. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Фазовые переходы и критические свойства спиновых систем с фрустрациями // Материалы XXXIII Международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2010». Екатеринбург, 2010. С.51-52.
21. Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., Men'shenin V.V., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Frustrations and phase transitions in Ising model on 2D lattices // IV Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism": Nanospintronics EASTMAG-2010. 2010. P.360
22. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Phase transition in frustrated Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice with next-nearest neighbor interactions // Book of Abstracts MISM. Moscow. 2011. P. 516.
23. Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Influence of field on frustrations in low-dimensional magnets // Book of Abstracts MISM. Moscow. 2011. P. 850.
24. Муртазаев А.К., Камиров И.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критические свойства фрустрированной  $3d$  модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке // Сборник научных трудов «Структурные и динамические эффекты в упорядоченных средах». Уфа: РИЦ БашГУ 2006. С.8-13.
25. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке. // Труды международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2007. С.60-64.
26. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга. // Материалы V всероссийская конференция по «ФЭ – 2008». Махачкала 2008. С. 265 – 268.

27. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критическое поведение фрустрированных спиновых систем на треугольной решетке // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2009. С.6-9.
28. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Компьютерное моделирование антиферромагнетика на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2009. С.42-44.
29. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К., Магомедов Г.М., Мамаева С.М. Компьютерное моделирование фазовых переходов в антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2009. С.107-109.
30. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированной двумерной модели изинга на квадратной решетке // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2009. С.297-299.
31. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Абуев Я.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // Межвузовский сборник научных трудов «Структурные и динамические эффекты в упорядоченных средах». Уфа, 2009. С.17-24.

32. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Компьютерное моделирование антиферромагнетика на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов межрегиональной научно-технической конференции памяти профессора Валеева К.А. «Актуальные проблемы естественных и технических наук». Уфа, 2009.
33. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Критическое поведение трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке. // Труды V Международной конференция студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук». Томск, 2009.
34. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Компьютерное моделирование антиферромагнетика на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала 2010. С.315-318.
35. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Бадиев М.К. Исследование фрустрированной модели Изинга с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов международной конференции «Инноватика-2011». Том 2. Махачкала. 2011. С. 28-29.
36. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Сборник трудов международной конференции «Инноватика-2011». Том 2. Махачкала. 2011. С. 24-25.

**Диссертация** состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

*В главе I* дано изложение классического метода Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю.

В разделе 1.1 рассмотрен классический метод Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю, а также практическая реализация процедуры метода Монте-Карло для систем с дискретным (модель Изинга) и непрерывным (модель Гейзенберга и XY-модель) распределением состояний. Также коротко рассмотрен вопрос о выборе начальной конфигурации системы.

Раздел 1.2 посвящен описанию решеточных моделей, наиболее часто используемых при исследованиях кооперативных явлений в решеточных системах. Рассматриваются модели как с дискретными состояниями спинов так и с непрерывным распределением состояний спинов (модель Гейзенберга). Здесь также кратко описаны некоторые модели ФС.

В разделе 1.3 рассмотрен стандартный алгоритм метода Монте-Карло, основанный на перевороте одного спина (алгоритм Метрополиса). Показано, что в критической области в фрустрированных системах этот алгоритм сталкивается с проблемой так называемого «критического замедления».

В разделе 1.4 дано описание репличного алгоритма метода МК. Этот алгоритмы, в отличие от стандартного алгоритма метода МК, позволяет преодолеть проблему многочисленных долин локальных минимумов энергии, возникающую при исследовании ФС.

В разделе 1.5 рассмотрены различные виды граничных условий, применяемых для устранения погрешности, связанной с малостью исследуемой системы, возникающей при изучении систем, содержащих конечное число частиц.

В разделе 1.6 подробно анализируются ошибки, возникающие при моделировании методом Монте-Карло, и рассматриваются вопросы,

связанные с оценкой погрешности метода Монте-Карло. Также в разделе приводятся различные меры, применяемые для исключения различных непредвиденных ошибок.

**В главе II** дается обзор результатов теоретических и экспериментальных исследований статических критических свойств фрустрированных спиновых систем.

Раздел 2.1 посвящен обсуждению природы спиновых стекол и фрустрированных спиновых систем.

В разделе 2.2 приведена конкуренция обменного взаимодействия и возникновение фрустрации на примере треугольной решетки.

Раздел 2.3 посвящен обсуждению литературных результатов экспериментальных и численных исследований критических свойств антиферромагнетиков на треугольной решетке.

В разделе 2.4 подробно изложены основные положения теории конечно-размерного скейлинга. Даются особенности определения статических критических индексов и критической температуры.

В разделе 2.5 представлены результаты исследования критических явлений фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием.

**В главе III** на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло исследуются статические критические свойства фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке.

В разделе 3.1 рассматриваются термодинамические критические свойства фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке с различными типами межплоскостного обменного взаимодействия.

Анализ результатов численного эксперимента проводится в разделе 3.2. Анализ данных проводится как традиционными степенными функциями, так и на основе теории КРС.

В разделе 3.3 рассматривается критическое поведение фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

В разделе 3.4 рассматривается природа фазовых переходов в фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

***В заключении*** представлены обобщающие выводы по результатам диссертационной работы.

## ***ГЛАВА I. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО.***

### **§ 1.1. Классический метод Монте-Карло.**

Понятие “статистическое моделирование” тесно связано с понятием “метод Монте-Карло” и почти ему тождественно.

Для решения задач методом Монте-Карло необходимо получать на ЭВМ последовательность выборочных значений случайной величины с заданным распределением. Такой процесс принято называть моделированием случайной величины. Случайные величины обычно моделируют с помощью преобразований одного или нескольких независимых значений, равномерно распределенной в интервале  $(0 \div 1)$ .

Методом Монте-Карло принято называть численный метод, в котором решение полностью детерминированной задачи заменяется приближенным решением, основанным на введении стохастических элементов, отсутствующих в исходной задаче [35].

В настоящее время в статистической физике удалось получить точное решение лишь для очень ограниченного числа моделей, описывающих фазовый переход второго рода [17]. Да и большинство из этих моделей относятся к простейшим моделям первого приближения. Также как метод молекулярного поля [5], различные теоретические приближения не адекватно описывают критические явления и вблизи  $T_c$  не работают. Таким образом, большинство результатов полученных в области теории фазовых переходов и критических явлений были получены на основе численных методов, таких как высоко- и низкотемпературных разложений,  $\epsilon$  - разложения и некоторых других [1-5]. Среди численных методов в последнее время все более важную и значительную роль играют методы Монте-Карло.



В 1953 году Метрополис и другие [43] применили метод Монте-Карло в каноническом ансамбле для расчета уравнения состояния двумерной модели-системы твердых дисков. После этого этот метод получил широкое применение на практике. А затем Вуд и др. распространили данный метод на трехмерные системы с гладким межчастичным потенциалом Леннарда-Джонса [44]. В наши дни метод МК и различные его варианты (кинетический, квантовый, кластерный, и др.) широко используется для решения задач физики, математики, биологии, астрономии, социологии и т.д. Особенно метод МК применяется к системам, для которых сделано предположение о взаимодействии между частицами системы. Надо отметить, что в принципе, методом МК можно получить сколь угодно точные результаты в зависимости от имеющегося в распоряжении машинного времени.

В данном случае погрешность вычислений, как правило, пропорциональна  $\sqrt{D/N}$ , где  $D$  – некоторая постоянная,  $N$  – число МК испытаний и контролируется в рамках самого метода.

В методе МК система совершает случайные блуждания по конфигурационному пространству. Путем усреднения по каноническому конфигурационному ансамблю можно с успехом вычислить любую равновесную термодинамическую характеристику системы. Последовательность различных конфигураций, реализуемых в методе МК, можно рассмотреть и как временную эволюцию системы. Как мы увидим ниже, этот динамический аспект метода МК, очень важен. Ибо это, во-первых, связано с интерпретацией и расчетом “статистических ошибок” метода. Применение метода Монте-Карло к ансамблю, находящемуся в произвольном состоянии, обеспечивает релаксацию ансамбля в состояние теплового равновесия. Динамическая интерпретация этого процесса позволяет понять, почему в некоторых случаях время релаксации может быть очень большим. Во-вторых, появляется возможность исследования

величин, которые зависят от времени и динамических критических явлений. А это, в свою очередь, значительно расширяет область применения методов МК.

Сосредоточимся здесь на стандартном методе МК, имея в виду особенности, связанные с исследованием критических явлений. По мере необходимости будем пользоваться “магнитной” терминологией и опираться на модель Изинга и Гейзенберга, ибо они являются наиболее наглядными примерами дискретной и непрерывной систем. При изложении будем следовать работам [40, 45].

Рассмотрим систему из  $N$  классических частиц в объеме  $V$ , при заданной температуре  $T$ . Каждая частица, помеченная индексом  $i$ , будет описываться множеством динамических переменных  $\{\alpha_i\}$ . Например, применительно к модели Гейзенберга  $\{\alpha_i\}$  есть единичный вектор  $\vec{S}_i$ , который ориентирован в направлении магнитного момента. Обозначим через  $\vec{x} = \vec{x}(\{\alpha_i\})$  точку фазового пространства или конфигурацию системы. Взаимодействия между частицами системы описываются гамильтонианом  $H_N(\vec{x})$ . Тогда термодинамические средние наблюдаемой величины  $A(\vec{x})$  можно представить в виде:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\vec{x} A(\vec{x}) \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}{\int d\vec{x} \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}, \quad (1.1)$$

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

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_k A(\vec{x}_k) \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}{\sum_k \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}, \quad (1.2)$$

В принципе, интегралы типа (1.1), можно вычислить стандартными способами, или напрямую случайным образом выбирая точки  $\vec{x}_v$  в фазовом

пространстве [35]. Но надо иметь в виду, что эти способы не подходят для задач статистической физики, т.к. подинтегральное выражение  $\exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)$  может изменяться на многие порядки, особенно при практически интересных температурах. Использованный Метрополисом и др. в [43], вариант метода МК, основан на идее “существенной выборки”. В этом случае точки фазового пространства выбираются не случайно, а в соответствии с доминирующим вкладом в сумму (1.1). Это означает выбор состояний  $\vec{x}_v$  в соответствии с некоторой плотностью вероятности  $P(\vec{x}_v)$ :

$$P(\vec{x}_v) = \frac{\exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1}^M \exp(-H(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (1.3)$$

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

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v) P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}{\sum_{v=1}^M P^{-1}(\vec{x}_v) \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T)}. \quad (1.4)$$

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

$$P(\vec{x}_v) = P_{eq}(\vec{x}) \sim \exp(-H_N(\vec{x}_v)/k_B T), \quad (1.5)$$

при котором (1.4) превращается в среднее арифметическое

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(\vec{x}_v), \quad (1.6)$$

где  $M$ -общее число состояний выработанных в Монте-Карло процессе. Однако в реальных случаях точное выражение для  $P_{eq}(\vec{x}_v)$  неизвестно. Можно организовать случайное блуждание  $\{\vec{x}_v\}$  в фазовом пространстве с помощью марковского процесса так, чтобы  $P(\{\vec{x}_v\})$  сходилось  $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$

при  $M \rightarrow \infty$ . Данный процесс определяется переходными вероятностями  $W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})$  из состояния  $\vec{x}_v$  в состояние  $\vec{x}_{v'}$ . Для того, чтобы марковский процесс обладал свойством сходимости  $P(\{\vec{x}_v\})$  к  $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$  достаточно выполнение принципа детального равновесия:

$$P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}) \cdot W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v). \quad (1.7)$$

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

$$1. \quad \sum_{v'} W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = 1, \quad \text{для всех } v, \quad (1.8)$$

$$2. \quad W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) > 0, \quad (1.9)$$

$$3. \quad \sum_v P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}), \quad \text{для всех } v'. \quad (1.10)$$

При соблюдении условий (1.8) - (1.10) выполнение уравнения (1.7) означает, что отношение переходных вероятностей зависит только от изменения энергии  $\delta H = H_N(\vec{x}_{v'}) - H_N(\vec{x}_v)$  при переходе из состояния  $\vec{x}_v$  в состояние  $\vec{x}_{v'}$ ,

$$\frac{W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})}{W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v)} = \exp(-\delta H / k_B T). \quad (1.11)$$

Выражение (1.11) все еще оставляет произвол в выборе  $W$ . На практике чаще всего используются следующие две функции [35]:

$$W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\delta H / k_B T), & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \delta H \leq 0 \end{cases}, \quad (1.12)$$

или

$$W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = \frac{1}{2\tau} \left( 1 - \text{th} \left( \frac{\delta H}{2k_B} \right) \right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\delta H / k_B T)}{1 + \exp(-\delta H / k_B T)}, \quad (1.13)$$

где  $\tau$  – произвольный параметр.

Рассмотрим несколько вопросов, связанных с практической реализацией схемы (1.12, 1.13) и перехода из состояния  $\nu$  в состояние  $\nu'$ .

Выбор последовательных конфигураций  $\nu$  и  $\nu'$  в методе МК сильно зависит от используемой модели. Для модели с дискретными степенями свободы переход в новую конфигурацию заключается в выборе одного из возможных состояний для одной из переменных. Например, в модели Изинга  $\alpha_{\nu'} = -\alpha_{\nu}$ . В таких моделях с непрерывной симметрией, как XY - модель, или классическая модель Гейзенберга, конфигурационное пространство  $\{\alpha_{\nu}\}$  представляет собой совокупность ориентаций единичных векторов (спинов). А для модели Гейзенберга мы имеем  $\alpha_{\nu} \equiv (\theta, \varphi)$ . В таком случае один шаг Марковской цепи заключается в попытке переворота какого-либо спина, закрепленного в узле решетки, на некоторый случайный угол. Выбор спина для поворота осуществляется или случайным образом или же последовательно перебираются все спины. Если при последовательном выборе, каждый спин подвергался испытанию один раз, а при случайном выборе сделано  $N$  испытаний ( $N$  – число спинов в системе), то говорят, что выполнен один Монте-Карло шаг на спин (МКшаг/спин). Для выбора в пространстве нового случайного направления используются формулы

$$\cos \theta = 2\xi_1 - 1, \quad \varphi = 2\pi \cdot \xi_2, \quad (1.14)$$

где  $0 \leq \theta < \pi$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ,  $\theta$  и  $\varphi$  - углы в сферической системе координат;  $\xi_1$  и  $\xi_2$  – случайные числа равномерно распределенные в интервале  $(0, 1)$ . Для XY модели выбор нового направления осуществляется на плоскости  $\varphi = 2\pi\xi_1$ . Часто целесообразно выбирать новую степень свободы не полностью случайным образом, а из интервала вблизи предыдущего значения. Этот интервал затем может быть подобран

таким образом, чтобы средняя скорость переходов была оптимальной. Тогда

$$\varphi'_v = \varphi_v + \Delta\varphi(2\xi - 1). \quad (1.15)$$

В отдельных случаях бывает необходимо выбирать точки в фазовом пространстве неравномерно в соответствии с определенной закономерностью. Для решения проблем такого рода конструируется алгоритм, который генерирует  $\varphi_v$  пропорционально распределению вероятности  $P(\varphi_v) \sim \exp[-V(\varphi_i)/k_B T]$ .

Невозможно описать все варианты перехода из  $\bar{x}_v$  в  $\bar{x}_{v'}$ . Гибкость метода МК позволяет определить последовательность конфигураций в зависимости от типа задачи и применять его к самым разным проблемам.

Здесь же коснемся вопроса о выборе начальной конфигурации системы, который важен с точки зрения эффективности расчетов и статистических ошибок метода МК. Обычно задают случайную начальную конфигурацию, или упорядоченную по какому-либо принципу. При этом надо учесть, что выбор конкретного вида начальной конфигурации может в значительной мере влиять на времена релаксации моделируемых систем. Этот вопрос становится особенно актуальным для систем, где конфигурации почти «заморожены», например, для спиновых стекол или моделей, которые претерпевают фазовый переход без появления дальнего порядка, но с расходящейся восприимчивостью (XY-модель) [35]. Поэтому, наличие предварительной информации о статистических свойствах изучаемой модели может значительно облегчить решение вопроса о выборе начальной конфигурации. Хотя, в принципе, при наличии неограниченного «машинного времени», можно задать любую начальную конфигурацию.

## § 1.2. Численное моделирование. Эвристические модели.

### Модель Изинга.

Модель Изинга является наиболее часто используемой, самой простой и универсальной из всех моделей магнетиков при изучении критических явлений в решеточных системах. В этой модели спины размещены на  $d$ -мерной решетке. 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:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} S_i S_j - H_0 \sum_i S_i, \quad (1.16)$$

где  $J$  – параметр обменного взаимодействия между спинами,  $H_0$  – 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  $d = 2$  [17]. Здесь надо отметить и тот факт, что эти точные решения помогают оценить пригодность приближенных методов, используемых для трехмерных моделей. Кроме того, эти модели могут служить хорошим приближением для некоторых реальных физических систем, ибо существует большой класс магнитных кристаллов, которые могут быть отнесены к одномерным или двумерным.

Отметим, что для случая трехмерной модели Изинга, а для некоторых моделей и в одномерном случае, до настоящего времени еще не удалось решить ни одной аналогичной задачи. Поэтому, интерес к вопросу об исследовании фазовых переходов методами численного эксперимента тем более велик.

Метод Монте-Карло впервые применен для расчета энергии и намагниченности двумерной модели Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями в работе [46]. Этот расчет воспроизводит точный результат Онзагера для энергии с погрешностью в пределах 1% в широкой области и исключает непосредственную область критической точки. Подробное исследование модели Изинга на квадратной и простой кубической решетке было выполнено еще в 70-е годы [47-50].

В работах [49, 50] методом Монте-Карло 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 [50] отмечается сильная зависимость энергии, намагниченности и восприимчивости от линейного размера ячейки Монте-Карло со сдвигом температуры упорядочения в сторону низких температур по сравнению с макрообразцами. При наложении на систему ПГУ эти зависимости слабее, более того, в низкотемпературной области параметр порядка не зависит от размера системы. В работе [51] исследовано критическое поведение изинговского антиферромагнетика на объемно-центрированной решетке в магнитном поле.

Если учитывать взаимодействие с соседями, следующими за ближайшими, модель Изинга с ближайшими соседями может быть усовершенствована. Поэтому в последующие годы акцент сместился в сторону изучения моделей со сложными типами взаимодействий и на других классах решеток. Модель Изинга в дальнейшем изучалась с анизотропией [52], с биквадратным взаимодействием [53], в случайных полях [54, 55], в сильных магнитных полях [56], в поперечном поле [57], с трехспиновым взаимодействием [58], с четырехспиновым взаимодействием [59], в антиферромагнитных системах [60-62], с



фрустрацией [63, 64], с учетом взаимодействия между более далекими соседями [65-67], со смешанным значением спина [68]. Модель Изинга в различных размерностях подробно изучена в [20], 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. 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 критические индексы для модели Изинга и ее различных вариантов. В [68] сделан вывод о том, что результаты расчетов методом Монте-Карло для ограниченной модели Изинга позволяет проводить экстраполяцию и получать надежные результаты для макросистемы.

### **Модель Гейзенберга.**

Одной из наиболее интенсивно изучаемых моделей в статистической физике является модель Гейзенберга. В течение многих лет эта модель в различных размерностях интенсивно исследуется, используя различные методы, в том числе и методы Монте-Карло.

Гамильтониан модели Гейзенберга с взаимодействием между ближайшими соседями можно представить в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (1.17)$$

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

В работе [69] модель Гейзенберга подробно исследована на плоских квадратичных решетках размером  $45 \times 45$  со свободными границами и при наложении ПГУ. Результаты исследования данной работы показывают наличие сильных эффектов конечности системы (параметр дальнего

порядка очень слабо стремится к единице при низких температурах с увеличением размера решетки). Биндер и другие [70] методом Монте-Карло изучили суперпарамагнитную частицу с помощью гейзенберговской модели в конечной решетке со свободными границами и наблюдали некоторый сдвиг критической температуры. Отмечается также сильная зависимость намагниченности от формы частицы. В работе [71] методами численного эксперимента исследована трехмерная модель Гейзенберга на ограниченной решетке антиферромагнетика (со свободной поверхностью). Также исследованы термодинамические свойства частиц в зависимости от температуры, внешних магнитных полей, формы частицы, числа спинов в ячейке Монте-Карло. Изучены эффекты, обусловленные наличием свободной поверхности и различия в поведении отдельных спинов вблизи поверхности и внутри частицы.

В работе [22] проведены исследования модели Гейзенберга на простой кубической (ПК) решетке с размерами  $L \times L \times L$  и  $6 \leq L \leq 24$ . С большой точностью рассчитаны статические критические индексы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ , используя конечно-размерный скейлинг и оптимизированный гистограммный метод анализа данных [26, 27]. А в работе [19] исследована модель (1.17) на ПК и ОЦК решетках с размерами вплоть до  $L = 40$ . Рассчитаны различные термодинамические величины как функции температуры вблизи  $T_c$ . Хотя критические температуры для ПК  $T_c = 0.693035(37)$  и ОЦК  $T_c = 0.486798(12)$  решеток имеют разные значения, показано, что КИ для обоих типов решеток хорошо согласуются друг с другом. Аналогичные исследования выполнены и в [36], с проверкой ожидаемого эффекта от использования кластерного алгоритма на ПК решетке с  $L \leq 48$ . Выполнен тщательный гистограммный анализ данных и с использованием конечно-размерного скейлинга вычислены критические

индексы  $\nu$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\eta$ . Полученные в этих работах значения КИ находятся в превосходном согласии как между собой, так и с данными метода РГ и  $\varepsilon$ -разложения. Авторы [36] изучили также пространственные корреляции и восприимчивость в высокотемпературной фазе на решетках с размерами до  $L = 100$ . Результаты моделирования показывают, что оценки для  $\nu$  и  $\gamma$  при этом можно извлекать прямо из МК данных по степенным зависимостям, не привлекая другие методы анализа. Если это так, то, в скором времени появиться возможность рассчитывать критические параметры непосредственно из МК экспериментов, не используя при этом многочисленные «хитрости» и технические приемы. К такому выводу мы приходим, учитывая темпы развития вычислительных мощностей современных компьютеров.

Коснемся еще одной интересной работы [72], где исследована модель жидкости с гейзенберговским спином и взаимодействием. В такой жидкости наблюдается ФП порядок-беспорядок при изменении температуры и фиксированном значении плотности «частиц-спинов». Используя теорию конечно-размерного скейлинга рассчитаны температуры ФП и КИ при разных значениях концентрации спинов. Доказано, что индексы  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $1/\nu$  для всех концентраций ( $p = 0.4, 0.6, 0.7$ ) одинаковы и отличаются от значений для решеточной модели Гейзенберга.

Среди множества работ, посвященных исследованиям моделей реальных систем, можно отметить [73-81]. В этих работах исследованы модели реального ферромагнитного гадолиния ( $Gd$ ), а также сложные многоподрешеточные антиферромагнетики со структурой корунда ( $\alpha$ - $Fe_2O_3$ ,  $Cr_2O_3$ ,  $V_2O_3$ ). В них изучены равновесные и динамические свойства системы в зависимости от температуры, внешних магнитных полей, числа спинов в системе, наличия свободной поверхности, а также вычислены все основные статические и динамические критические индексы. В работе [64]

исследована полностью фрустрированная модель Изинга на кубической решетке. Вычислены основные статические критические индексы. Установлено, что эта модель образует новый класс универсальности критического поведения.

А теперь рассмотрим модель, которая получила наибольшее распространение при исследовании фрустрированных систем методами МК.

**Антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.** Гамильтониан для этой модели имеет следующий вид [10]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J' \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (1.19)$$

где  $\vec{S}_i$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J < 0$  и  $J' > 0$  – константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1.19) характеризует внутрислоистое антиферромагнитное взаимодействие спинов, а второй – межслоистое ферромагнитное. Фрустрации в этой модели обусловлены геометрией решетки. Основные критические свойства этой модели изучены в работах [8, 10, 11]. Вычислен набор магнитных критических индексов. По данным этих работ можно предположить, что данная модель может принадлежать к новому классу универсальности, но этот вопрос все еще остается дискуссионным.

Кроме того, существует еще огромное количество моделей фрустрированных систем. Так антиферромагнитная фрустрированная XY модель на треугольной решетке исследовалась в работах [82-84]. Теоретические данные, а также результаты численного эксперимента показывают, что критические индексы этой модели отличаются от критических индексов соответствующей нефрустрированной модели.

Причем фрустрации в этих моделях обусловлены либо конкуренцией обменных взаимодействий, либо геометрией решетки.

### § 1.3. Стандартный алгоритм метода Монте-Карло.

На практике для модели Изинга наиболее часто используются алгоритм переворота спина и алгоритм спинового обмена. Общеизвестно, что алгоритм переворота одного спина не оставляет полную намагниченность системы неизменной, в то время как алгоритм спинового обмена ее сохраняет. Отсюда следует что, эти алгоритмы соответствуют реализациям различных термодинамических ансамблей. Установлено, что в термодинамическом пределе при  $N \rightarrow \infty$  различные ансамбли в статистической механике дают одинаковые результаты. Исходя из этого может создаться мнение, что выбор статистического ансамбля и соответствующего алгоритма обусловлен лишь удобством их применения. Однако эффекты конечных размеров системы по разному проявляются в различных ансамблях и, кроме того «скорости» достижения в компьютерном эксперименте равновесных конфигураций могут различаться. Поэтому выбор статистического ансамбля является весьма деликатным вопросом.

Стандартный алгоритм классического метода Монте-Карло для модели Изинга может быть представлен в следующем виде:

1. Задать начальную конфигурацию спинов с энергией  $U_i$ .
2. Случайным образом выбрать один из узлов решетки и попытаться перевернуть его:  $S_i^{old} \rightarrow S_i^{new}$  (для модели Изинга  $S_i^{new} = -S_i^{old}$ ).
3. Вычислить изменение энергии системы  $\Delta U = (U_j - U_i)$ .

4. Если  $\Delta U \leq 0$ , то переход в новое состояние принимается и спин переворачивается. Перейти к шагу 8.
5. Если  $\Delta U > 0$ , то вычислить вероятность перехода:  $p_{ij} = \exp[-\Delta U/k_B T]$
6. Генерировать случайное число  $\xi$ , лежащее между нулем и единицей.
7. Если  $\xi < p_{ij}$ , то переход в новое состояние принимается и спин переворачивается, в противном случае спин не переворачивается и сохраняется старое состояние системы.
8. Проанализировать полученную конфигурацию и сохранить рассчитанные величины для последующего усреднения.
9. Повторить шаги 2 – 8 необходимое число раз.
10. Вычислить средние значения термодинамических величин.

При использовании стандартного алгоритма метода Монте-Карло возникает еще одна сложность, связанная с вероятностью перехода. При очень низких температурах лишь очень мизерная часть попыток переворота спина оказывается удачной. Движение системы в фазовом пространстве является очень медленным, и для перехода системы в равновесное состояние требуется генерация огромного числа состояний. Для ускорения сходимости в случае  $k_B T \approx 0$  необходимо применять другие алгоритмы. В частности, следует разработать алгоритм, совершающий только удачные Монте-Карло шаги.

Необходимо знать, что здесь может сильно сказаться выбор начальной конфигурации. В принципе процедура метода Монте-Карло гарантирует переход в состояние теплового равновесия из любой начальной конфигурации. Однако выбор начальной конфигурации может существенно повлиять на время релаксации в равновесное состояние. В подобных случаях обычно выбирают случайную начальную конфигурацию

или упорядоченную по какому-либо принципу. Иногда в качестве начальной конфигурации при данной температуре задают равновесную конфигурацию, полученную при проведении вычислений для ближайшей температуры.

#### **§ 1.4. Репличный алгоритм метода Монте-Карло.**

Методы МК являются ценным инструментом для изучения классических систем. Об этом свидетельствуют многочисленные исследования, выполненные этими методами [18, 22, 85, 86]. Однако вблизи критической точки эффективность этого метода резко падает, и мы сталкиваемся с проблемой так называемого «критического замедления». Критическое замедление является одним из наиболее серьезных источников трудностей при исследовании фазовых переходов и критических явлений методами МК.

Согласно современным представлениям теории фазовых переходов и критических явлений, время релаксации системы в точке фазового перехода  $T_c$  расходится как [1, 3]:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1.20)$$

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

Для многих моделей характерное значение  $z \approx 2$  [1, 3]. Таким образом, при  $T \rightarrow T_c$  время релаксации системы очень быстро растет. Увеличение времени релаксации ( $\tau \rightarrow \infty$ ) делает описанный выше стандартный алгоритм метода МК не эффективным вблизи точек фазовых переходов второго рода. Эта неэффективность обусловлена тем, что в алгоритме Метрополиса, Монте-Карло испытание заключается в попытке переворота одного спина, тогда как эффекты, связанные с фазовыми

переходами обусловлены флуктуациями спиновых кластеров больших размеров.

Для систем с конечными размерами, используемых при компьютерном моделировании, размеры спиновых кластеров ограничены размерами самой системы  $L$  [21]. В этом случае при  $T = T_c$ :

$$\tau \sim L^z. \quad (1.21)$$

В настоящее время предложен ряд новых алгоритмов для метода МК, позволяющих в той или иной мере преодолеть проблему критического замедления [24-27, 87-89].

Имеется и ряд других подходов, в которых используются и различные гибридные алгоритмы, направленные на преодоление конкретных частных проблем [90-98].

Из всех этих алгоритмов наиболее эффективным, для исследования фрустрированных спиновых систем, считается репличный обменный алгоритм метода МК. Об этом свидетельствуют исследования спиновых стекол и молекулярных белковых соединений, проведенные на основе этого алгоритма [42, 90, 91].

Репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло был развит для параллельного моделирования системы при разных температурах [90, 91].

Рассмотрим систему, которая состоит из  $M$  невзаимодействующих реплик в каноническом ансамбле, которые имеют разные температуры  $T_m$  ( $m=1, 2, \dots, M$ ). Реплики в системе создаются таким образом, чтобы каждой реплике соответствовали разные температуры. Это соответствие между репликами и температурами можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} i = i(m) \equiv f(m), \\ m = m(i) \equiv f^{-1}(i), \end{cases} \quad (1.22)$$

где  $f(m)$  - функция перестановки  $m$ ,  $f^{-1}(i)$  его инверсия.



Обозначим через  $X = \{x_1^{[i(1)]}, \dots, x_M^{[i(M)]}\} = \{x_{m(1)}^{[1]}, \dots, x_{m(M)}^{[M]}\}$  множество состояний в обобщенном ансамбле. Состояние  $X$  определяется набором  $M$  координат  $q^{[i]}$  и импульсов  $p^{[i]}$  для  $N$  атомов в реплике  $i$  при температуре  $T_m$  [42]:

$$x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m. \quad (1.23)$$

Поскольку реплики не взаимодействуют между собой, то вероятность для состояния  $X$  в этом обобщенном ансамбле пропорциональна больцмановскому фактору для каждой реплики [42]:

$$\begin{aligned} W(X) &= \exp\left\{-\sum_{i=1}^M \beta_{m(i)} H(q^{[i]}, p^{[i]})\right\} = \\ &= \exp\left\{-\sum_{m=1}^M \beta_m H(q^{[i(m)]}, p^{[i(m)]})\right\}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

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

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

$$X = \{\dots, x_m^{[i]}, \dots, x_n^{[j]}, \dots\} \rightarrow X' = \{\dots, x_m^{[j]}, \dots, x_n^{[i]}, \dots\}. \quad (1.25)$$

Здесь  $i, j, m$  и  $n$  связаны функциями перестановки в формуле (1.22), и обмен реплик представляет новую функцию перестановки  $f'$ :

$$\begin{cases} i = f(m) \rightarrow j = f'(m), \\ j = f(n) \rightarrow i = f'(n). \end{cases} \quad (1.26)$$

Более подробно обмен между репликами можно представить в следующем виде:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_m^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_m \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_n^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_n \end{cases}, \quad (1.27)$$

где  $p^{[i]}$  и  $p^{[j]}$  будут описаны ниже. Этот процесс эквивалентен обмену пары температур  $T_m$  и  $T_n$  для соответствующих реплик  $i$  и  $j$ . Его можно представить и в следующем виде [42]:

$$\begin{cases} x_m^{[i]} \equiv (q^{[i]}, p^{[i]})_m \rightarrow x_n^{[i']} \equiv (q^{[i]}, p^{[i']})_n \\ x_n^{[j]} \equiv (q^{[j]}, p^{[j]})_n \rightarrow x_m^{[j']} \equiv (q^{[j]}, p^{[j']})_m \end{cases} \quad (1.28)$$

В первоначальном исполнении репличный обменный алгоритм [90, 91], используемый в методе МК учитывал только координаты  $q$  (и функцию потенциальной энергии  $E(q)$ ). Этот алгоритм в молекулярной динамике имеет дело и с импульсом  $p$ , который определяется следующим образом [42]:

$$\begin{cases} p^{[i']} \equiv \sqrt{\frac{T_n}{T_m}} p^{[i]} \\ p^{[j']} \equiv \sqrt{\frac{T_m}{T_n}} p^{[j]} \end{cases} \quad (1.29)$$

Для сходимости к распределению равновесия, для этого обменного процесса, достаточно наложить условие детального баланса на вероятность перехода  $w(X \rightarrow X')$  [42]:

$$W(X)w(X \rightarrow X') = W(X')w(X' \rightarrow X). \quad (1.30)$$

Отсюда следует

$$\frac{w(X \rightarrow X')}{w(X' \rightarrow X)} = \exp(-\Delta), \quad (1.31)$$

где

$$\Delta \equiv (\beta_n - \beta_m)(E(q^{[i]}) - E(q^{[j]})), \quad (1.32)$$

и  $i, j, m$  и  $n$  связаны функциями перестановки (формула (1.22)) перед обменом [42]:

$$\begin{cases} i = f(m) \\ j = f(n) \end{cases} \quad (1.33)$$

В соответствии со схемой Метрополиса обмен осуществляется следующим образом [43]:

$$w(X \rightarrow X') \equiv w(x_m^{[i]} | x_n^{[j]}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0 \end{cases}, \quad (1.34)$$

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

Тогда репличный обменный алгоритм, представляет собой поочередное выполнение следующих двух шагов [42]:

1. Одновременно моделируются несколько реплик с определенными температурами в каноническом ансамбле независимо от количества МК шагов.
2. Пара реплик, соответствующие соседним температурам ( $x_m^{[i]}$  и  $x_{m+1}^{[j]}$ ), после выполнения определенного количества МК шагов обмениваются с вероятностью  $w(x_m^{[i]} | x_{m+1}^{[j]})$ .

Этот метод моделирования особенно подходит для параллельных компьютеров.

Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными алгоритмами обобщенного ансамбля, таких как мультиканонический алгоритм [42, 96] в том, что вероятность обмена априорна известна, тогда как для последних алгоритмов определение вероятности очень утомительно и отнимает много времени.

В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по «температурному интервалу», которая в свою очередь стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы застревания системы в многочисленных состояниях с локальными минимумами энергии. Однако для увеличения эффективности этого метода требуется увеличение числа реплик, что требует больших компьютерных мощностей для моделирования сложных систем [42]. Несмотря на это, этот репличный алгоритм является наиболее

последовательным и специализированным для моделирования фазовых переходов в спиновых стеклах и фрустрированных магнитных системах.

### **§ 1.5. Граничные условия.**

Число составляющих частиц в реальных статистических системах достигает  $N \cong 10^{23}$ . В зависимости от моделируемой системы и используемых при этом параметров при расчетах на современных ЭВМ приходится ограничиваться числом частиц от нескольких десятков до нескольких сотен тысяч. Поэтому подход к изучению поведения реальных макроскопических систем на основе расчетов для малых систем представляет собой одно из наиболее серьезных приближений метода Монте-Карло [35]. Для того чтобы осуществить разумную экстраполяцию на термодинамический предел на систему необходимо накладывать различные граничные условия [35].

Условие **«свободных поверхностей»**, моделирующее частицу является физически наиболее простым условием. Тогда взаимодействие через поверхность частицы принимаются равными нулю. При условии свободных поверхностей рекомендуется делать выборку на поверхности (и в прилегающих слоях) больше, чем внутри объема.

При наложении **«случайных граничных условий»** на поверхности системы допускается действие случайных сил. Эти силы строятся так, что их корреляционная функция совпадает с корреляционной функцией реальных сил, действующих через мысленно проведенную поверхность общей системы. Подобная методика пока еще трудна в реализации, тем не менее представляет потенциальный интерес, так как она может открыть новые перспективы применения метода Монте-Карло [35].

Для устранения влияния граничных эффектов при моделировании макросистем с помощью образцов, содержащих сравнительно небольшое

число частиц, обычно используются так называемые **«периодические граничные условия»**. В сложных системах это просто означает отождествление  $(n + 1)$ -го слоя с первым. При этом не возникают свободные границы и стенки. Следует учесть, что выбор подходящих линейных размеров и граничных условий должен осуществляться осторожно. Например, если для изинговского ферромагнетика линейный размер может быть четным или нечетным, то в случае изинговского антиферромагнетика этот размер должен быть четным, иначе структура антиферромагнетика не будет совпадать с решеткой. В отдельных случаях иногда вводят **«антипериодические граничные условия»**, когда  $(n + 1)$ -й слой отождествляется с первым, но знак локального параметра порядка меняется на обратный. Хотя периодичность и является разумным условием для любой конечной системы, это условие не является наилучшее приближение для бесконечной системы [35].

На практике часто используют граничные условия типа **«эффективного самосогласованного поля»**. В этой методике используются свободные граничные условия и некоторое «эффективное поле». Это поле взаимодействует лишь со свободными поверхностями системы. Это условие ликвидирует граничные эффекты в рамках теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау, в то время как в общем случае это выполняется лишь приближенно. Этот метод приводит к ярко выраженной критической точке с показателями среднего поля. Но все же, этот метод предпочтительней: если использовать только свободные поверхности, или только периодические граничные условия, то возникает сглаживание критических аномалий вблизи  $T_c$ . В случае «эффективного поля» имеет место переход от истинного критического поведения к критическому поведению среднего поля, но не сглаживание.

Дальнейшее усложнение состоит в замене постоянного эффективного поля **«случайно флуктуирующим эффективным полем»** с

тем же средним. Но все же надо помнить, что все эти приемы значительно усложнятся, если рассматривать несколько параметров порядка, как это имеет место в системах с несколькими упорядоченными фазами. Тогда бы возникла необходимость построить эффективное граничное поле для каждой из этих упорядоченных фаз и определить эти поля в совместной итерационной процедуре. Надо учесть, что возможны и другие способы наложения граничных условий, а также использование различных граничных условий в сочетании друг с другом [35].

### **§ 1.6. Анализ ошибок в методе Монте-Карло.**

От точности самого метода и от того, насколько исследуемая модель соответствует реальной системе, зависит надежность результатов, полученных методами Монте-Карло. А последнее зависит от того, правильно ли описано взаимодействие частиц друг с другом, и как учтены квантовые эффекты и т.д. При анализе точности метода Монте-Карло следует различать **статистическую** погрешность, которая обусловлена конечностью числа испытаний (цепи Маркова), и **систематическую** погрешность, обусловленную конечностью числа частиц в моделируемой системе, периодическими граничными условиями и приближениями при подсчете термодинамических характеристик системы [20].

Когда радиус корреляции становится больше линейных размеров системы, возникают систематические ошибки, т.е. при приближении к точке фазового перехода. Но все же использование основ теории конечно-размерного скейлинга позволяет довольно хорошо снимать эффекты конечных размеров, и соответственно уменьшить связанные с ними систематические ошибки.

Одно из основных ограничений метода Монте-Карло – это конечность марковской цепи, и связанная с ней статистическая погрешность. Время наблюдения, в принципе, должно быть бесконечным,

а это, естественно, невозможно реализовать. При проведении численного эксперимента неизбежно возникает очень деликатный вопрос: что лучше, считать небольшую систему и набрать большую статистику, или же считать большую систему, но с малой статистикой?

При выборе размеров моделируемой системы необходимо учитывать большое количество различных часто взаимоисключающих факторов, которые зависят от исследуемой модели, изучаемых термодинамических параметров, близости к критической области, типа компьютера, на котором проводятся расчеты, способа программирования, и целого ряда других факторов. Естественно все это требует от исследователя осторожности и большого опыта.

Рассмотрим более подробно статистическую погрешность. Допустим, что мы провели  $M$  последовательных наблюдений некоторой величины  $A$ :

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(x_v). \quad (1.35)$$

Статистическая ошибка  $\delta A$  этой величины  $\bar{A}$  может быть представлена в следующем виде:

$$\overline{\delta A^2} = \frac{1}{M} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right], \quad (1.36)$$

А теперь рассмотрим среднеквадратичную статистическую погрешность, возникающую при проведении  $M$  последовательных наблюдений величины  $A_v \equiv A(X_v)$  [20]:

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \left\langle \left[ \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle = \\ &= \frac{1}{M^2} \left\langle \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle)^2 \right\rangle + \frac{2}{M^2} \sum_{v_1=1}^M \sum_{v_2=v_1+1}^M \left( \langle A_{v_1} \cdot A_{v_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \end{aligned} \quad (1.37)$$

Заменяя суммирование  $\nu_2$  на  $\nu_2 + \nu$  и, учитывая, что при тепловом равновесии имеется трансляционная инвариантность вдоль марковской цепи, уравнение (1.37) можно записать в следующем виде:

$$\langle \delta A^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] + \left\{ 1 + \frac{2}{M} \sum_{\nu=1}^M \left( 1 - \frac{\nu}{M} \right) \varphi_A^{(\nu)} \right\}, \quad (1.38)$$

где  $\varphi_A^{(\nu)}$  – автокорреляционная функция, которую можно задать в следующем виде:

$$\varphi_A^{(\nu)} = \frac{\langle A_{\nu_1} \cdot A_{\nu_1+\nu} \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.39)$$

Данный результат можно интерпретировать ассоциировано со временем  $t_{\nu} = \delta t \cdot \nu$ , связанным с Монте-Карло процессом. Величина  $\delta t$  – интервал времени между двумя последовательными наблюдениями  $A_{\nu}$  и  $A_{\nu+1}$ . И имеется возможность положить  $\delta t = 1/N$ , т.е. усреднение проводится после каждого Монте-Карло шага (или другими словами, после каждого переворота спина в случае стандартного алгоритма Метрополиса), где  $N$  – число испытаний. При этом легко показать, что последовательные состояния  $X_{\nu}$  становятся сильно коррелированными при больших значениях  $N$ . Следовательно, более общим является выбор  $\delta t = 1$  (соответствующему временной единице в 1 МК шаг на спин). Следует иметь в виду и то, что вблизи критической температуры  $T_c$  часто более эффективным является выбор большего интервала времени, к примеру,  $\delta t = 10$ . Таким образом, заменяя  $\varphi_A^{(\nu)}$  на  $\varphi_A(t)$  (отмечая также инвариантность соотношений относительно выбора начала временного отсчета), можно записать:

$$\varphi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.40)$$



Заменив в уравнении (1.38) суммирование интегрированием по времени, получим:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right] \left\{ 1 + 2 \int_0^{t_M} \frac{dt}{\delta t} \left( 1 - \frac{t}{t_M} \right) \varphi_A(t) \right\}. \quad (1.41)$$

В этом случае время релаксации  $\tau_A$  можно определить как

$$\tau_A = \int_0^{\infty} \varphi_A(t) dt, \quad (1.42)$$

и, полагая, что время наблюдения  $\tau_M \gg \tau_A$ , уравнение (1.41) можно записать в следующем виде:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right] \cdot \left( 1 + \frac{2\tau_A}{\delta t} \right). \quad (1.43)$$

Если время  $\tau_A/\delta t \ll 1$ , то  $(1 + 2\tau_A/\delta t) \approx 1$  и

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \approx \frac{1}{M} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right], \quad (1.44)$$

если  $\tau_A/\delta t \gg 1$ , тогда

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \approx 2 \frac{\tau_A}{\tau_M} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right]. \quad (1.45)$$

Данная формула утверждает, что статистическая погрешность не зависит от выбора временного интервала  $\delta t$ , а зависит только от величины  $n = \tau_M/(2\tau_A)$ . За фиксированное время  $t_v$  выбор меньшего значения  $\delta t$  приводит к большому числу наблюдений, но не приводит к уменьшению статистической погрешности. Для уменьшения погрешности существенно лишь отношение времени релаксации  $\tau_A$  к времени наблюдения за системой  $\tau_M$ .

Следовательно, оценка времени релаксации необходима для правильной оценки величины статистических ошибок. Из этих же

соображений становится очевидным необходимость разработки алгоритмов, которые уменьшают критическое замедление около точки фазовых переходов или, при возможности, даже удаляют его полностью. Обычно,  $\langle \delta A \rangle$  не равно значению  $(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) / M$ , полученному для простой выборки, а отличается от него на множитель  $(1 + 2\tau_A / \delta t)$ . Этот множитель обуславливает «**статистическую неэффективность**» метода.

Становится очевидным, что самый простой способ уменьшить статистическую погрешность, это увеличить число независимых (некоррелированных) испытаний. Однако очень часто идти по этому пути невозможно из-за ограниченности вычислительных мощностей современных компьютеров. Существует и другой способ воспользоваться зависимостью погрешности от размеров моделируемой системы: если при увеличении размеров системы погрешность уменьшается достаточно быстро, то, возможно, имеет смысл исследовать систему с большими размерами, но с меньшей статистикой. Систематические ошибки метода Монте-Карло связаны также и с конечными размерами моделируемых систем. Когда радиус корреляции  $\xi$  становится больше линейных размеров системы  $L$ , возникают конечно-размерные эффекты. В точке фазового перехода  $\xi \rightarrow \infty$  и преодолеть проблему конечных размеров  $L < \infty$  невозможно. Тем не менее, использование идей конечно-размерного скейлинга [29, 30, 99–102] позволяет предсказывать свойства бесконечно больших систем исходя из данных, полученных для конечных систем.

Другим немаловажным аспектом статистических ошибок является вопрос, как они зависят от линейных размеров моделируемых систем. Таким образом, для намагниченности  $m$  и энергии  $E$  можно показать, что среднеквадратичная статистическая погрешность обратно пропорциональна размерам системы  $N = L^d$  [20]:

$$\langle(\delta m)^2\rangle = \frac{2\tau_m k_B T \chi}{\tau_M L^d}, \quad (1.46)$$

$$\langle(\delta E)^2\rangle = \frac{2\tau_E k_B T^2 C}{\tau_M L^d}. \quad (1.47)$$

«Сильным самоусреднением» принято называть случай, когда среднеквадратичная погрешность меняется обратно пропорционально размерам системы. Данный случай наблюдается только вдали от  $T_c$ , поскольку в  $T_c$  оно заменяется так называемым «слабым самоусреднением».

Отсюда вытекает, что в  $T_c$  для систем с конечными размерами  $\chi$  и  $C$  масштабируются как  $\chi(T=T_c) \propto L^{\gamma/\nu}$ ,  $C(T=T_c) \propto L^{\alpha/\nu}$ , где  $\alpha$ ,  $\gamma$  и  $\nu$  – статические критические индексы теплоемкости, восприимчивости и радиуса корреляции соответственно.

Тогда мы имеем [20]:

$$\langle(\delta m)^2\rangle \propto \frac{1}{n} L^{\gamma/\nu-d}, \quad T = T_c, \quad (1.48)$$

$$\langle(\delta E)^2\rangle \propto \frac{1}{n} L^{\alpha/\nu-d}, \quad T = T_c. \quad (1.49)$$

Если мы рассматриваем ошибки величин, которых находим из флуктуационных соотношений, таких как, к примеру, теплоемкость  $C$  и восприимчивость  $\chi$  то ситуация сильно изменяется. В этом случае можно записать [20]:

$$(k_B T \Delta \chi)^2 = \frac{1}{n} L^{2d} \left[ \langle(\delta m)^4\rangle - \langle(\delta m)^2\rangle^2 \right], \quad (1.50)$$

$$(k_B T^2 \Delta C)^2 = \frac{1}{n} L^{2d} \left[ \langle(\delta E)^4\rangle - \langle(\delta E)^2\rangle^2 \right]. \quad (1.51)$$

Вдали от  $T_c$  и  $\delta m$  и  $\delta E$  при достаточно больших  $L$  имеют гауссовское распределение,  $\langle(\delta m)^4\rangle = 3\langle(\delta m)^2\rangle^2$  и  $\langle(\delta E)^4\rangle = 3\langle(\delta E)^2\rangle^2$ , поэтому уравнения (1.50 – 1.51) можно записать в следующем виде:

$$\sqrt{\langle(k_B T \Delta \chi)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} L^d \langle(\delta m)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} k_B T \Delta \chi}, \text{ т.е. } \sqrt{\langle(\Delta \chi)^2\rangle} / \chi = \sqrt{2/n}, \quad (1.52)$$

$$\sqrt{\langle(k_B T^2 \Delta C)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} L^d \langle(\delta E)^2\rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} k_B T^2 \Delta C}, \text{ т.е. } \sqrt{\langle(\Delta C)^2\rangle} / C = \sqrt{2/n}. \quad (1.53)$$

Из вышеизложенного, мы видим, что относительная ошибка величин, определяемых из флуктуационных соотношений, не уменьшается совсем с повышением  $L$ , но становится небольшой только тогда, когда число статистически независимых состояний  $n$  становится большим. Данный случай называется «**плохим самоусреднением**» [20].

Таким образом, при проведении численного эксперимента исследователь должен обладать большим опытом, и требуется значительная осторожность для недопущения различных непредсказуемых ошибок.

Чтобы застраховаться от различных непредвиденных ошибок рекомендуется принимать различные меры [35]:

1. **Контрольные тесты.** Для контрольных тестов сначала прогоняют программу для системы, у которого есть точное аналитическое решение или же проверяют выполнения каких-либо тождеств для данной системы, которые известны аналитически. Сравнивая эти результаты с точными результатами, мы можем судить о точности данного метода.
2. **Сопоставление с предельными аналитическими выражениями.** В условиях слабой неидеальности справедливы строгие теории, основанные на разложениях по малому параметру; существуют также модельные задачи, которые имеют точные решения.

Сравнивая результаты Монте-Карло эксперимента с ними можно также оценить точность данного метода.

3. **Самосогласованность результатов.** Результаты расчета различных термодинамических характеристик системы по различным соотношениям должны быть согласованными друг с другом в пределах статистической погрешности.
4. **Дублирование результатов.** Результаты, полученные с помощью различных микроскопических ансамблей, для одних и тех же модельных систем должны дублировать друг друга. Аналогичное дублирование должно быть и при использовании различных датчиков псевдослучайных чисел.

## **ГЛАВА II. ФРУСТРИРОВАННЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ.**

### **§ 2.1. Атомный порядок и беспорядок.**

Среди многих типов магнитоупорядоченных веществ особое место принадлежит так называемым спиновым стеклам [103]. Обоснованием этого термина служит тот факт, что ориентация элементарных магнитных моментов атомов спинового стекла в области температур ниже некоторой величины  $T_f$  (индекс от англ. freezing — замерзание) не имеет никакой пространственной периодичности. Она меняется в пространстве случайным образом подобно тому, как случайно расположены атомы в обычном стекле. В отличие от парамагнетиков, где элементарные магнитные моменты флуктуируют во времени, спиновые стекла характеризуются наличием "замороженных" магнитных моментов. Это означает, что атомные магнитные моменты имеют ненулевые средние (по времени) векторные величины. Последнее подтверждают исследования эффекта Мёссбауэра, которые показывают наличие эффективных магнитных полей, действующих на магнитные атомы. Другими словами, картину стационарного распределения атомных магнитных моментов в спиновом стекле можно представить как мгновенную фотографию магнитных моментов парамагнетика. Многочисленные исследования, проведенные к настоящему времени, свидетельствуют, что универсальной причиной возникновения состояния спинового стекла является сочетание атомного беспорядка и конкуренции обменных взаимодействий. Следовательно, изучение состояния спинового стекла — часть общей проблемы изучения атомно-неупорядоченных магнетиков, то есть веществ, в которых атомный беспорядок есть следствие случайного распределения атомов различного сорта (химический беспорядок) или неупорядоченного

расположения в пространстве атомов одного сорта (стеклообразное или аморфное состояние).

Физика атомно-неупорядоченных систем развивается в последние два десятилетия очень бурно, что связано с самой логикой развития фундаментальных и прикладных исследований в физике твердого тела. Действительно, современная физика твердого тела — это преимущественно физика кристаллов. Наличие правильной кристаллической решетки позволило создать изящный математический аппарат теории. Естественно стремление к построению физики более сложных систем типа аморфных тел и полимеров. Из общих соображений мы вправе ожидать, что отсутствие атомного порядка может привести к важным и нетривиальным последствиям. Перспективы технических применений связаны с возможностью создания качественно новых веществ, что ярко иллюстрируется, например, созданием уникальных по магнитным характеристикам аморфных магнетиков [104-107].

Первая попытка построить теорию СС была сделана Эдвардсом и Андерсоном [108]. Они предположили, что с понижением температуры происходит переход в состояние со случайно распределенным молекулярным полем, однозначно определяющим ориентацию каждого спина. Теория Эдвардса - Андерсона объясняет излом в температурной зависимости восприимчивости, обнаруженной впервые в работе Канеллы и Мидоша [109], но не в состоянии объяснить явлений необратимости и долговременной релаксации. Поэтому возникает потребность в последовательной теории, не использующей каких-либо априорных предположений о природе основного состояния.

В последнее время все большее внимание уделяется ФС, но их изучение практически еще не вышло за рамки теоретических моделей. Таким образом, на сегодняшний день широкий круг вопросов, относящихся к проблеме ФС, остается открытым [110].

Накопленный к настоящему времени богатый экспериментальный материал показывает, что спиновое стекло — новое магнитное состояние вещества с особыми свойствами. Во многом это обусловлено невыполнением в этой уникальной системе принципа эргодичности, лежащего в основе статистической механики. Невыполнение указанного принципа означает несовпадение результатов усреднения физических параметров системы по времени и ансамблю.

Идеальная степень пространственного порядка наблюдается в совершенном кристалле. Он представляет совокупность очень большого числа идентичных атомов или молекул, упакованных регулярным образом в объеме кристалла. Математическая суть дела сводится к инвариантности системы относительно операции переноса или трансляции в решетке кристалла: физические свойства в некоторой точке пространства  $\mathbf{r}$  точно воспроизводятся в любой другой точке, координаты которой удовлетворяют условию

$$\mathbf{r} + \mathbf{l} = \mathbf{r} + l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3.$$

Здесь  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  три некопланарных вектора, характеризующих кристалл, а  $l_1, l_2, l_3$  — целые числа. Наличие беспорядка всегда нарушает трансляционную инвариантность. Простейший тип беспорядка реализуется в твердом растворе замещения. В идеальном кристалле можно заменить атом элемента А на атом другого элемента В без существенного искажения кристаллической решетки. Если при этом узлы, в которых происходит замещение атомов А атомами В, сами по себе не образуют регулярной решетки, то мы имеем пример беспорядка замещения. В противоположном случае возникает так называемая сверхрешетка.

Другим типом неупорядоченной системы являются вещества, в которых расположение атомов не соответствует упорядоченной решетке. Таковы, например, аморфные вещества и жидкости.



Важным следствием атомного беспорядка неупорядоченных систем является наличие случайно изменяющихся парных взаимодействий атомов. Например, обменные взаимодействия, определяющие взаимную ориентацию магнитных моментов взаимодействующих атомов [103], будут случайно изменяться от одной пары атомов к другой паре как в результате химического беспорядка, так и в результате флуктуации расстояния между атомами и их геометрической конфигурации. Задача нахождения магнитной структуры такой неупорядоченной системы становится чрезвычайно сложной.

## **§ 2.2. Конкуренция обменных взаимодействий, фрустрация.**

Мы ограничимся рассмотрением лишь таких магнитных систем, в которых основным типом взаимодействия является обменное. Как известно обменное взаимодействие имеет электростатическое происхождение. Квантовомеханическое рассмотрение многоэлектронной системы показывает, что ее энергия существенно зависит от спинового (магнитного) состояния. Из-за определенной симметрии по отношению к перестановке электронов, которой должна обладать электронная система (принцип Паули), возникает эффективное взаимодействие, зависящее от взаимной ориентации их собственных магнитных моментов. Это и есть обменное взаимодействие. В зависимости от электронной структуры взаимодействующих атомов (ионов) обменное взаимодействие может быть ферромагнитным или антиферромагнитным. В первом случае оно приводит к параллельному выстраиванию элементарных магнитных моментов атомов. Во втором случае энергетически более выгодно антипараллельное выстраивание моментов. Обменное взаимодействие может происходить и непосредственно между парой магнитных атомов (прямое обменное взаимодействие), и через посредство промежуточных атомов или электронов проводимости (косвенное обменное

взаимодействие). Это приводит к тому, что величина и вид обменного взаимодействия могут сильно зависеть от расстояния между взаимодействующими атомами, вида промежуточного иона и геометрии взаимного расположения атомов.

Энергия обменного взаимодействия системы магнитных атомов в общем случае может быть записана в виде

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

где суммирование ведется по индексам  $i$  и  $j$ ,  $i$  и  $j$  — номера взаимодействующих магнитных атомов,  $S_i$ ,  $S_j$  — их магнитные моменты, обусловленные, как правило, наличием у атома отличного от нуля магнитного момента. В такой записи ферромагнитному взаимодействию атомов  $i$  и  $j$  соответствует  $J_{ij} > 0$ , антиферромагнитному —  $J_{ij} < 0$ .

Рассмотрим три произвольных взаимодействующих между собой спина (рис.2.1) и будем считать, что взаимодействия одинаковы по величине, но могут иметь разный знак.

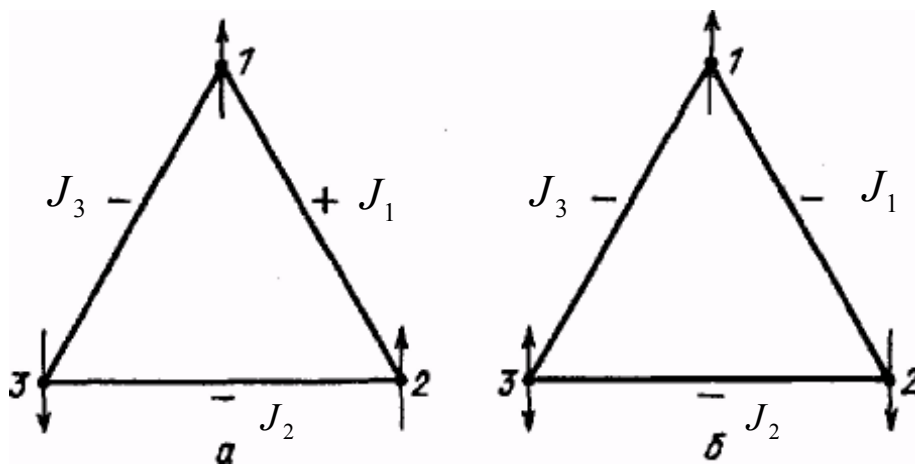


Рис.2.1. Фрустрации в системе из трех спинов.

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.2.1,а). 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.2.1,б 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 - от английского слова *frustration*.

Этот термин впервые ввел в проблематику спиновых стекол G. Toulouse [111].

Известно, что беспорядок в системе обусловлен эффектами фрустрации, то есть конкуренцией связей, которой не удовлетворяет любая конфигурация спинов. Для элементарного треугольника, со всеми отрицательными связями, невозможно выбрать ориентацию спинов

треугольника, по крайней мере, без одной «фрустрированной» связи. Этот эффект фрустрации может быть выражен функцией [105]:

$$\phi_f = J_1 J_2 J_3 / |J|^3, \quad (2.2)$$

где  $J_i$  – параметр обменного взаимодействия.

В общем виде для любой замкнутой системы ( $J_{ij} = \pm J$ ) [105]:

$$\phi_f = \prod_c J_{ij} / |J|, \quad (2.3)$$

где произведение осуществляется по всем связям системы.

Беспорядок, существующий при  $\phi_f = +1$ , не представляет собой особого интереса, в то время как важен беспорядок при  $\phi_f = -1$ , когда фрустрация присутствует. Подставив соответствующие значения  $J$ , можно определить  $\phi_f$  для элементарных ячеек решетки (элементарные треугольники на треугольной решетке, элементарные квадраты на квадратной решетке, так называемые плакеты).

Если в системе много фрустраций, тогда конфигурация фрустрированных плакетов образует сложную сеть. В другом случае, если рассматривать пару фрустрированных плакетов на нефрустрированном фоне, дополнительная энергия из-за фрустраций будет пропорциональна длине минимального расстояния между двумя плакетами (струне). Следовательно, основное состояние квадратной решетки определяется набором струн минимальной длины, соединяющих фрустрированные плакеты. Конечно, решение этой проблемы несколько не уникально: различные решения отвечают за различные основные состояния. Следовательно, эти соображения дают точную конструкцию различных упорядоченных состояний, по крайней мере, для модели ближайших соседей на квадратной решетке. К сожалению, нет никакого аналитического решения этой проблемы, и, следовательно, можно

использовать еще раз формулировку для изучения свойств основного состояния только посредством числовых алгоритмов, которые решают проблему оптимизации длины струны на компьютере [105].

Далеко не любой беспорядок является существенным для термодинамического поведения системы, и именно фрустрации являются той самой частью беспорядка, которая существенно изменяет поведение системы по сравнению с соответствующей упорядоченной системой. Другими словами, если беспорядок таков, что он не создает в системе фрустрации, то он в некотором смысле не является существенным, т.е. не влияет на свойства основного состояния, а иногда и просто является как бы «фиктивным», т.е. устранимым некоторым преобразованием спиновых переменных. Фрустрации - это та часть беспорядка, которая неустранима никаким преобразованием переменных [112].

В многоспиновых системах можно нарисовать огромное число всевозможных замкнутых многоспиновых цепочек, и если при этом спин-спиновые взаимодействия случайны по знаку, то, соответственно, будет присутствовать большое число фрустраций, и это может привести к колоссальному вырождению основного состояния. В действительности, вырождение именно основного состояния, по-видимому, и не очень важно - важно, что 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 [112].

В спиновом стекле существует некоторая  $T_c$ , выше которой система находится в парамагнитном состоянии и эргодичность не нарушена. При понижении температуры ниже  $T_c$  происходит фазовый переход нарушения эргодичности, при котором фазовое пространство разделяется не на две, как в ферромагнетике, а на множество «долин», разделенных

бесконечными барьерами свободной энергии. Сразу ниже точки перехода, при  $T=T_c - \delta T$  (для простоты описания здесь удобно ввести дискретность температуры, хотя на самом деле этот процесс непрерывный), каждая такая долина характеризуется тем, что в каждом узле существуют ненулевые термодинамические средние  $\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)}$ , которые от узла к узлу случайны как по знаку, так и по величине; здесь  $\langle \dots \rangle_{(\alpha)}$  - обозначает термодинамическое усреднение внутри долины номер  $\alpha$ . При этом физический параметр порядка [112-114]:

$$q = \frac{1}{N} \sum_i (\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)})^2, \quad (2.4)$$

описывающий степень «замерзания» спинов в каждой из долин, оказывается одинаковым во всех долинах. При  $T \rightarrow T_c$   $q \rightarrow 0$ .

При дальнейшем понижении температуры на  $\delta T$  в каждой из долин происходит новый фазовый переход нарушения эргодичности: каждая долина дробится на много (бесконечно много в макроскопической системе) новых долин, разделенных барьерами свободной энергии (рис.2.2). При этом состояние системы в каждой из вновь образованных

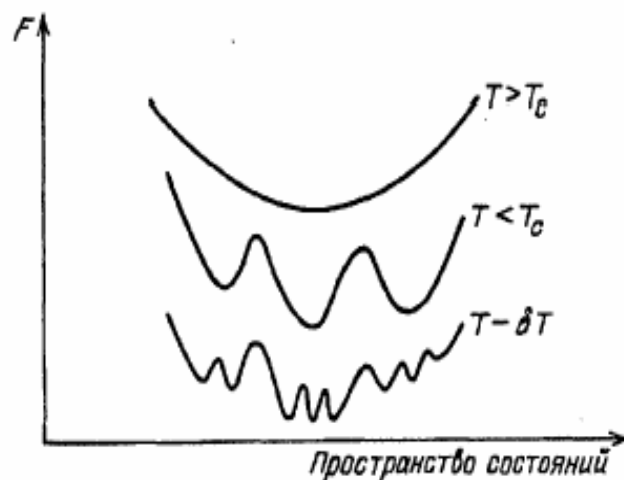


Рис.2.2. Поведение структуры рельефа свободной энергии при понижении температуры.

долин описывается соответствующим параметром порядка (2.4) который при понижении температуры, естественно, увеличивается.

Этот процесс дробления фазового пространства продолжается непрерывно вплоть до нулевой температуры. В этом смысле при любой температуре ниже  $T_c$  система находится в точке фазового перехода нарушения эргодичности [112]. Кроме того, при любой температуре ниже  $T_c$  внутри каждой из долин, имеющих при этой температуре, существует бесконечно много метастабильных состояний, разделенных между собой конечными барьерами. Внутри каждой долины имеются барьеры любой высоты, и, таким образом, спектр высот этих барьеров простирается вплоть до бесконечности. Это приводит к тому, что за любое конечное время внутри этих долин, строго говоря, настоящего термодинамического равновесия никогда не наступает. Хотя, с другой стороны, эксперимент показывает, что часть наблюдаемых термодинамических величин, таких, например, как теплоемкость, ведет себя так, как будто термодинамическое равновесие существует: они не зависят от времени и воспроизводимы (т.е. к тому же одинаковы во всех долинах). С другой стороны, существуют наблюдаемые, поведение которых явно зависит от времени на любом масштабе доступных современному эксперименту времен. В связи с этим возможность применения методов традиционной статистической механики (распределение Гиббса и т.п.) представляется весьма загадочной [112].

### **§ 2.3. Критические свойства антиферромагнетиков на треугольной решетке.**

Исследования ФП и КЯ в слоистых антиферромагнетиках с треугольной решеткой представляет особый интерес. В таких системах антиферромагнитное взаимодействие приводит к фрустрации (рис.2.3,а).

Классическим ( $S \rightarrow \infty$ ) основным состоянием такой системы является  $120^\circ$ -ная структура (рис.2.3б,в). Однако это состояние оказывается вырожденным: обменная энергия для спиновых конфигураций на рис.2.3б,в одинакова, но эти конфигурации различны. При обходе против часовой стрелки углы между двумя соседними спинами равны  $120^\circ$  (б) и  $240^\circ$  (в). Это различие описывается вектором киральности

$$C_{123} = S_1 \times S_2 + S_2 \times S_3 + S_3 \times S_1. \quad (2.14)$$

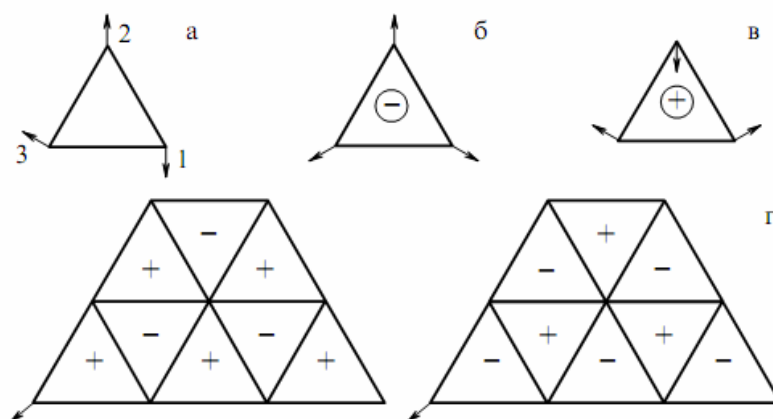


Рис. 2.3. Элементарный спиновый треугольник в антиферромагнетиках с треугольной решеткой.

Условно можно говорить, что конфигурации на рис.2.3б,в имеют положительную и отрицательную киральность.

Таким образом, антиферромагнетики с треугольной решеткой принципиально отличаются от обычных ферро- или антиферромагнетиков, где задание направления спина в одном из узлов полностью определяет структуру. В случае антиферромагнетиков с треугольной решеткой при заданном направлении спина одного из узлов возможны две различных структуры. Можно построить так называемую дуальную решетку с узлами в центрах треугольников (рис.2.3,г). Тогда киральность будет вести себя точно



так же, как изинговский спин, т.е. принимать два различных значения: "+" и "-". Эти соображения привели Кавамуру к представлению о новом классе универсальности при фазовых переходах второго рода [10, 11, 115].

Как известно, в современной теории фазовых переходов второго рода критические индексы флуктуирующих величин определяются в том числе и размерностью параметра порядка  $n$  (так называемой  $O(n)$ -класс универсальности) [1, 3]. Для гейзенберговских магнетиков  $n=3$ , для XY-систем  $n=2$ . В первом случае симметрия параметра порядка совпадает с симметрией сферы единичного радиуса ( $SO(3)$ ), а во втором – с симметрией окружности ( $S_1$ ). В антиферромагнетиках с треугольной решеткой связанное с киральностью двукратное вырождение меняет симметрию параметра порядка на  $Z_2 \times SO(3)$  и  $Z_2S_1$  в первом и втором случаях соответственно, где  $Z_2$  – двухэлементная группа, отвечающая изинговскому спину. Аналогичная ситуация имеет место и в спиральных магнетиках, где группа  $Z_2$  отвечает за два возможных направления вращения спирали [116].

Таким образом, согласно работам [10, 11, 115] антиферромагнетики с треугольной решеткой и спиральные магнетики должны принадлежать к киральным классам универсальности  $O(3)$  и  $O(2)$ . Первый реализуется в случае изотропного взаимодействия Гейзенберга, второй - при наличии сильной легкоплоскостной анизотропии (XY-модель). Соответственно, критические индексы теплоемкости, намагниченности, восприимчивости и корреляционной длины ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ ) должны отличаться от индексов гейзенберговских магнетиков, XY-ферро- и XY-антиферромагнетиков.

В работах [10, 11, 115] приведены результаты вычислений методом Монте-Карло и методами  $\epsilon$ -разложения (разложение  $4 - \epsilon$ ) и разложения по  $1/n$ , подтвердившие это утверждение. Особенно сильно различаются индексы теплоемкости:  $\alpha = 0,24 \pm 0,08$  ( $n = 3$ ) и  $\alpha = 0,34 \pm 0,06$  ( $n = 2$ ) в случае киральной универсальности в отличие от  $\alpha \approx -0,116$  для обычных

магнетиков. Это предсказание теории хорошо согласуется с результатами многочисленных экспериментов [115].

Однако результаты работ Кавамуры неоднократно подвергались сомнению как на основании ренормгрупповых, так и численных расчетов [82, 117], хотя в последнем случае критические индексы незначительно отличались от полученных в работах [10, 11, 115]. По существу главный вывод этих работ состоит в том, что реально имеет место фазовый переход первого рода, но очень близкий ко второму. Кроме того, делались экзотические утверждения о том, что температуры переходов в киральное и антиферромагнитное состояния не совпадают и что различны индексы корреляционных длин киральных и антиферромагнитных флуктуаций. Может оказаться, что проверка всех этих утверждений, по-видимому, находится за пределами точности современных экспериментов.

Наиболее нетривиальным качественным результатом работ [10, 11, 115] является вывод о том, что наряду с вектором антиферромагнетизма критической величиной является спиновая киральность, флуктуации которой определяются новыми критическими индексами  $\beta_k$ ,  $\gamma_k$  и  $\nu_k$ .

Поляризованные нейтроны позволяют определить два киральных критических индекса из трех. Если верна картина скейлинга для антиферромагнетиков с треугольной решеткой, то выполняется соотношение [10, 11, 115]:

$$\alpha + 2\beta_k + \gamma_k = 2, \quad (2.15)$$

где  $\alpha = 2 - 3\nu$  — индекс теплоемкости, из которого следует, что  $\nu_k = \nu$ . Следовательно, исходя из скейлинга и используя поляризованные нейтроны, можно определить все критические индексы. В качестве первого объекта экспериментального исследования киральности в антиферромагнетиках с треугольной решеткой был выбран XY-антиферромагнетик CsMnBr<sub>3</sub>. Это вещество имеет гексагональную структуру  $R\bar{6}_3/mmc_1$ . Антиферромагнетизм в

плоскости  $ab$  возникает при  $T_N \approx 8,3$  К. Этот фазовый переход хорошо изучен экспериментально [118-122].

В таблице 2.1 приведены критические индексы теплоемкости, корреляционной длины, восприимчивости и намагниченности  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\gamma$  и  $\beta$  определенные численным методом Монте – Карло и экспериментально.

*Таблица 2.1. Значения критических индексов антиферромагнетиков на треугольной решетке.*

КИ	Kawamura [11].	Bhattacharya <i>et al</i> [19]	Mailhot <i>et al</i> [117]	Эксперимент [118-122]	Heisenberg
$T_c$	0.958(4)	0.9576(2)	0.9577(2)	-	-
$\nu$	0.59(2)	0.585(9)	0.586(8)	0,54(3) [120]; 0,57(3) [121]	0.705
$\alpha$	0.24(8)	-	-	0,39(9) [118]; 0,40(5) [119]	-0.116
$\beta$	0.30(2)	0.289(10)	0.285(11)	0,21(2) [120]; 0,25(1) [122]	0.36
$\gamma$	1.17(7)	1.176(20)	1.185(3)	1,01(8) [120]; 1,10(5) [121]	1.387
$\nu_k$	0.60(3)	-	-	-	-
$\beta_k$	0.55(4)	-	-	0,44(2) [123]	-
$\gamma_k$	0.72(8)	-	-	0,84(7) [123]	-

Результаты расчетов численного эксперимента [11,19,117] хорошо согласуются с полученными экспериментально, но отличаются от критических индексов чистой модели Гейзенберга.

#### **§ 2.4. Основные положения теории конечно-размерного скейлинга.**

Теория конечно-размерного скейлинга, предложенная Фердинандом и Фишером, призвана учесть влияние конечных размеров системы на

критические свойства [29, 30, 99-102]. Идеи, заложенные в этой теории, позволяют экстраполировать МК результаты, полученные для систем с конечными размерами, к термодинамическому пределу  $N=L^3 \rightarrow \infty$ , и широко используются [9, 21, 22, 64, 73-75]. Согласно этой теории свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре  $T$ , близкой к критической температуре  $T_c$  бесконечной системы может быть представлена в виде:

$$F(T, L) \sim L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.16)$$

где  $t = \frac{|T - T_c|}{T_c}$ ,  $T_c = T_c(L = \infty)$  и  $\nu$  – статический критический индекс

радиуса корреляции бесконечной системы ( $L = \infty$ ).

При этом смещение «эффективной температуры перехода» с изменением размеров системы происходит в соответствии с выражением:

$$\frac{k_B T_c(L)}{|J|} = \frac{k_B T_c}{|J|} + aL^{-\nu}, \quad (2.17)$$

где  $a$  – некоторая константа.

Выражение (2.16) ведет к аналогичным зависимостям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящейся на один спин [5, 17,]:

$$C(T, L) \sim L^{g/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.18)$$

$$m(T, L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.19)$$

$$\chi(T, L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.20)$$

также можно показать, что [17]:

$$m_0(T) \sim (-t)^\beta \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.21)$$

$$m(H, T_c) \sim H^{1/\delta} \quad \text{при } H \rightarrow 0, \quad (2.22)$$

$$\chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.23)$$

$$\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.24)$$

$$\xi(0, T) \sim t^{-\nu} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.25)$$

$$\xi(0, T) \sim (-t)^{-\nu'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.26)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\nu$ ,  $\nu'$  и  $\delta$  – статические критические индексы для системы с  $L = \infty$ , связанные соотношениями гиперскейлинга [5, 17]:

$$\gamma = \gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (2.27)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.28)$$

$$\nu = \nu', \quad (2 - \eta)\nu = \gamma, \quad (2.29)$$

$$\delta = \frac{2 - \alpha + \gamma}{2 - \alpha - \gamma}, \quad (2.30)$$

$$2 - \alpha = d\nu. \quad (2.31)$$

Уравнения (2.18) – (2.20) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечных систем при  $t \ll 1$  и  $L \rightarrow \infty$ .

Справедливость применения теории конечно-размерного скейлинга к простым хорошо известным моделям была показана в целом ряде работ [18]. Насколько хорошо работает теория КРС применительно к моделям с кроссоверами, проверена лишь на весьма ограниченном числе моделей [18, 60, 73, 74, 77]. Исследование моделей, в которых возможны несколько

кроссоверных переходов кластерными алгоритмами метода МК на основе теории КРС, насколько нам известно, вообще не проводилось.

Обратим внимание еще на один момент. При расчете критических индексов намагниченности  $\beta$  и восприимчивости  $\gamma$  используются следующие выражения:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2.32)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.33)$$

которые получаются из (3.19) и (2.20) при  $T=T_c$ . Эти соотношения позволяют легко определить  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$ . В то же время, данные для теплоемкости по этой схеме описать не удастся. Поэтому при определении индекса  $\alpha$  на практике для масштабирования теплоемкости используется следующее выражение [11, 18 ]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (2.34)$$

где  $a$  – некоторый коэффициент.

Выражение (2.17) также малоприспособно для использования на практике из-за невысокой точности определения  $T_c$  на ее основе. Значительно более точным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [20, 74]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (2.35)$$

где  $m$  – намагниченность системы с линейными размерами  $L$ . Этот метод позволяет определить  $T_c$  с большой точностью. Ниже, на наших моделях, нами продемонстрирована высокая эффективность этого метода.

Отметим, что если в системе происходит фазовый переход 1-го рода, то вместо намагниченности  $m$  в (3.20) фигурирует энергия системы  $E$ :

$$U_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (2.36)$$

Наряду с температурой фазового перехода большую роль при исследовании критических свойств играет и точность определения критического индекса радиуса корреляции  $\nu$ . Однако, его вычисление традиционно сталкивается с серьезной проблемой – определить  $\nu$  с большой точностью очень сложно. Ситуация улучшилась с использованием кумулянтов Биндера. Биндер показал, что кумулянты имеют максимальный наклон в точке фазового перехода  $T_c$  и зависимость максимума наклона от линейных размеров системы имеет вид [20, 21]:

$$\left. \frac{dU_L}{d\beta} \right|_{\max} = aL^{1/\nu} (1 + bL^{-\omega}), \quad (2.37)$$

где  $\beta = 1/T$  (обратная температура),  $b$  – некоторая постоянная,  $\omega$  – универсальная постоянная коррекции к скейлингу.

Расположение максимума может служить также в качестве оценки точки фазового перехода. Нами этот метод определения критического индекса радиуса корреляции  $\nu$  использовался наряду с другими методами, что позволяет сравнить различные методы между собой и оценить точность определения индекса. В настоящее время на основе теории конечно-размерного скейлинга [9, 85] предложен целый ряд способов определения критического индекса  $\nu$ . Например, производная от логарифма любой степени намагниченности может быть представлена в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \langle m^n \rangle = \frac{1}{\langle m^n \rangle} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle m^n \rangle = \left( \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle \right), \quad (2.38)$$

и имеет такие же скейлинговые свойства, как и кумулянт  $U_L$ .

Обобщая все выше сказанное, мы можем записать:

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (2.39)$$

где  $g_{V_n} = Const$ , а  $V_n$ , к примеру, может принимать следующие значения:

$$V_1 = \frac{\langle mE \rangle}{\langle m \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.40)$$

$$V_2 = \frac{\langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.41)$$

$$V_3 = \frac{\langle m^3 E \rangle}{\langle m^3 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.42)$$

$$V_4 = \frac{\langle m^4 E \rangle}{\langle m^4 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.43)$$

$$V_5 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[ \langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (2.44)$$

$$V_6 = 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.45)$$

$$V_7 = 2[m^2] - [m^4], \quad (2.46)$$

$$V_8 = 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.47)$$

$$V_9 = (4[m] - [m^4]) / 3, \quad (2.48)$$



$$V_{10} = (3[m] - [m^3]) / 2, \quad (2.49)$$

$$V_{11} = 2[m] - [m^2], \quad (2.50)$$

где  $[m^n] = \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}$ ,  $T$  – температура,  $\beta = 1/T$ .

А для определения статических киральных критических индексов восприимчивости  $\gamma_k$ , намагниченности  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu_k$  использовались соотношения теории конечно-размерного скейлинга [9, 11].

$$m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}, \quad (2.51)$$

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}, \quad (2.52)$$

$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_n}, \quad (2.53)$$

где в качестве  $V_{nk}$  выступает:

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{\langle m_k^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i=1, 2, 3, 4). \quad (2.54)$$

### **§ 2.5. Фрустрированная модель Гейзенберга с переменным межслойным обменным взаимодействием.**

В этом параграфе мы рассмотрим исследования антиферромагнитной трехмерной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием.

Антиферромагнитная  $3d$  модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке является фрустрированной магнитной системой. Эта модель может быть представлена в виде трехмерной решетки, которая состоит из двумерных треугольных слоев сложенных по ортогональной оси. Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде [10].

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J' \sum_{\langle il \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_l), \quad (2.55)$$

где  $\vec{S}_i$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J < 0$  и  $J' > 0$  – константы обменного взаимодействия.  $r = J'/J = 0.01-1.0$  – соотношение межслойного и внутрислойного обменов.

Первый член в формуле (2.55) характеризует внутрислойное антиферромагнитное взаимодействие спинов, а второй – межслойное ферромагнитное. Фрустрации в этой модели обусловлены геометрией решетки [10].

Среди многочисленных магнитных кристаллов, достаточно близким к рассматриваемой модели является соединение  $RbFe(MoO_4)_2$ . Кристаллическая структура  $RbFe(MoO_4)_2$  относится к группе  $D_{3d}^3$  и состоит из слоев магнитных ионов  $Fe^{3+}$ , разделенных компонентами  $(MoO_4)^{2-}$  и ионами  $Rb^+$ . Кристаллографическая ось  $C^3$  перпендикулярна слоям. Ионы  $Fe^{3+}$  образуют правильные треугольные решетки, а ионы  $Rb^+$  и ионы  $Fe^{3+}$  соседних плоскостей находятся друг над другом, на прямых, параллельных оси  $C^3$ . Такая слоистая структура обеспечивает магнитную квазидвумерность. В экспериментальных работах с порошковыми и монокристаллическими образцами был обнаружен переход в упорядоченное состояние при  $T=T_N=3.8K$  и наблюдалось плато намагниченности  $M_s/3$ . Экспериментальные данные критических индексов

теплоемкости и параметра порядка для этого соединения соответственно равны  $\alpha=0.40\pm 0.03$  и  $\beta=0.13\pm 0.02$  [124].

Интересные экспериментальные данные получены для квазидвумерных антиферромагнетиков  $VCl_2$  и  $VBr_2$ . В этих соединениях из-за слабого межплоскостного взаимодействия наблюдается температурный кроссовер от  $2d$  к  $3d$  поведению. Данные лабораторных экспериментов показывают, что критическое поведение в них сильно отличается от обычных нефрустрированных систем. Основной недостаток при наблюдении нового критического поведения в них – малая ширина критической области. Это очень затрудняет вычисление критических индексов таких систем. Тем не менее, экспериментальные значения критических индексов  $\alpha=0.59$ ,  $\beta=0.20$ ,  $\gamma=1,05$  и  $\nu=0.62$  для этих соединений свидетельствует о принадлежности их к новому классу универсальности критического поведения [33].

На сегодняшний день практически нет исследований зависимости критических свойств фрустрированных систем от величины  $r$ . Поэтому, для определения наличия зависимости критических индексов от  $r$ . нами проведены дополнительные исследования фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке при разных значениях  $r$  на основе репличного алгоритма метода МК. Расчеты проводились для систем с ПГУ и с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L=9 \div 30$  и  $r=1 \div 0.1$ .

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались выражения [12]:

$$C = (NK^2) \left( \langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right) \quad (2.56)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK) \left( \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), & T < T_N \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases} \quad (2.57)$$

$$\chi_k = \begin{cases} (NK) \left( \langle m_k^2 \rangle - \langle m_k \rangle^2 \right) T < T_k \\ (NK) \langle m_k^2 \rangle, & T \geq T_k \end{cases} \quad (2.58)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N$  – число частиц,  $m$  – магнитный параметр порядка,  $m_k$  – киральный параметр порядка,  $\chi$  – восприимчивость,  $\chi_k$  – киральная восприимчивость. Формулы (2.56) и (2.57) получаются из флуктуационно-диссипационной теоремы для системы конечных размеров. В пределе при  $N \rightarrow \infty$  выражения дают значения, которые характерны для макросистем.

Параметр порядка системы  $m$  вычислялся по формуле [9]:

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle / 3}, \quad (2.59)$$

где  $M_A$ ,  $M_B$  и  $M_C$  – намагниченности трех подрешеток, соответственно.

Намагниченность подрешетки определялась следующим образом [9]:

$$\langle |\vec{M}_r| \rangle = \langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \rangle, \quad r = A, B, C. \quad (2.60)$$

Наряду с вектором антиферромагнетизма величиной, характеризующей особенности упорядочения, является и спиновая киральность, флуктуации которых связаны с новыми критическими индексами  $\beta_k$ ,  $\gamma_k$  и  $\nu_k$ . Для вычисления кирального параметра порядка системы  $m_k$  использовались следующие выражения [10,11]:

$$m_k = \frac{1}{N} \sum_p m_{k,p} \quad (2.61)$$

$$m_{k,p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \times S_j)_p \quad (2.62)$$

где  $p$  – нумерует треугольные плакетты.

Для более точного определения критической температуры  $T_N$ , нами использовался метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка [20, 70], который определяется выражением (2.35). Согласно теории конечно-размерного скейлинга точка пересечения всех кривых  $U_L$  в их температурной зависимости является критической точкой [125-126].

На рис.2.4 и 2.5 представлены характерные зависимости Кумулянтов Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $r = 0.8$  и  $r = 0.01$ . Из графиков видно, что критическая температура  $T_N = 0.872$  для  $r = 0.8$  и  $T_N = 0.353$  для  $r = 0.01$  (здесь и далее температура дана в единицах  $|J|/k_B$ ).

Построив аналогичные зависимости, были определены значения критических температур и для всех остальных  $r = 0.01-1.0$ .

При определении киральной критической температуры  $T_k$  нами использовался метод пересечения кумулянтов (cumulant crossing), который считается для этого случая более точным и надежным [9,126]. В соответствии с этим методом зависимости кумулянтов  $U_L(T)$  для систем разных размеров строятся в приведенных масштабах  $\ln^{-1}(L_1/L)$ , где  $L_1$  и  $L$  размеры двух систем, при этом  $L_1 > L$ . Экстраполяция данных  $T_k$  при  $\ln^{-1}(L_1/L) \rightarrow 0$  соответствует критической температуре для бесконечной системы  $T_k(L \rightarrow \infty)$ . Характерные зависимости температуры  $T_k$  от величины  $\ln^{-1}(L_1/L)$  для  $L = 9 \div 30$  при  $r = 1$  и  $r = 0.05$  представлены на рис. 2.6 и 2.7. Из рисунков видно, что при  $\ln^{-1}(L_1/L) \rightarrow 0$  все зависимости для разных  $L$  сходятся к одной точке. Значение  $T_k$  в этой точке соответствует киральной критической температуре  $T_k = 0.956$  (2) для  $r = 1$  и  $T_k = 0.413$  (2) для  $r = 0.05$ .

Используя данный метод нами были определены значения киральных критических температур для  $r = 1; 0.8; 0.6; 0.3; 0.1; 0.075; 0.05; 0.01$  приведенные в таблице 2.3.

На рис.2.8 и рис.2.9 представлены характерные зависимости магнитного и кирального параметра порядка  $m$  и  $m_k$  от температуры для системы с линейным размером  $L=24$  и  $r=1; 0.5; 0.3; 0.1; 0.05; 0.01$ . (здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов использованных для построения зависимостей). Из графиков видно, что с уменьшением  $r$  спад магнитного и кирального параметра порядка смещается в сторону более низких температур. При  $r < 0.5$  при низких температурах на обоих рисунках наблюдаются характерные скачки. Можно предположить, что при  $r < 0.5$  система становится более вырожденной. Это способствует неравномерности хода зависимости  $m$  и  $m_k$  от температуры. При повышении температуры вырождение снимается, и осцилляции исчезают.

Температурные зависимости теплоемкости (рис. 2.10) и восприимчивости (рис 2.11) имеют хорошо выраженные максимумы в критической области. При этом уменьшение соотношения межслойного и внутрислойного обменов ведет к уменьшению температуры фазового перехода и, соответственно, смещению максимумов теплоемкости и восприимчивости в сторону низких температур. Для восприимчивости это смещение сопровождается увеличением максимумов. В то время как максимумы теплоемкости сначала, как и для восприимчивости, растут, затем при  $r = 0.05$  наблюдается постепенное уменьшение. Для восприимчивости аналогичное поведение не наблюдается, и максимум продолжает расти с уменьшением  $r$ .

На рис.2.12 представлены характерные зависимости магнитного  $m$  и кирального  $m_k$  параметров порядка от температуры для системы с линейными размерами  $L=30$  и  $r=1$ .

Видно, что в широкой области низких температур температурные зависимости магнитного  $m$  и кирального  $m_k$  параметра порядка

существенно различаются. В то же время в критической области отличия в поведении не столь существенны, что свидетельствует, что температуры фазового перехода для магнитного и карального параметра порядка совпадают или очень близки.

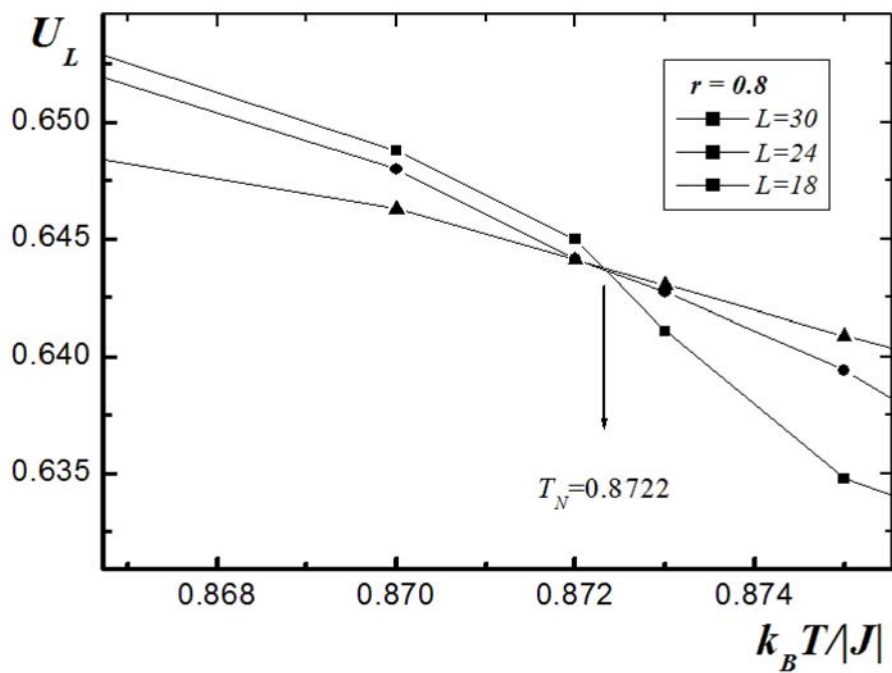


Рис.2.4. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $r = 0.8$ .

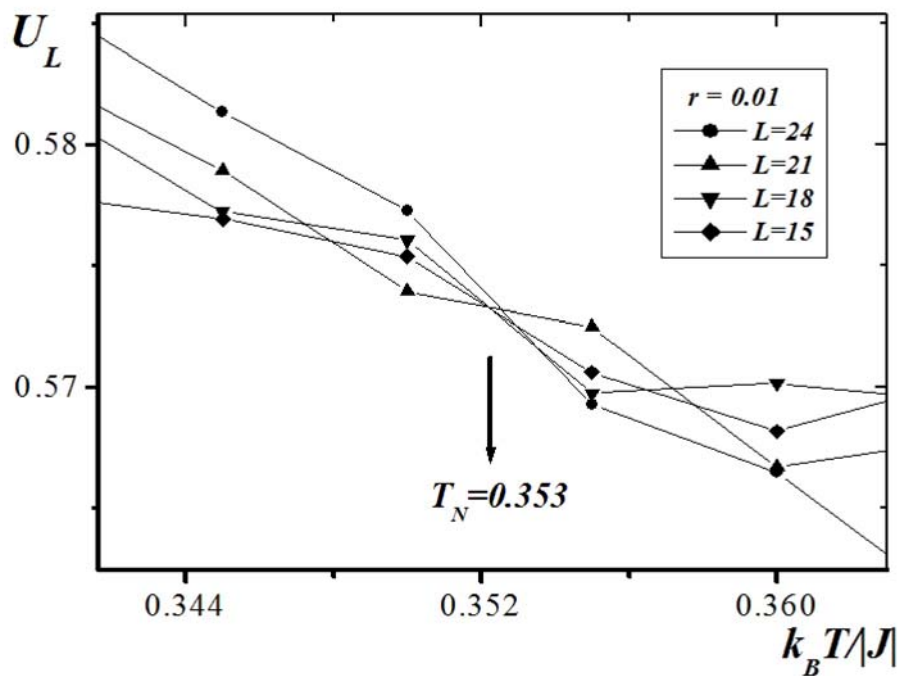


Рис.2.5. Зависимость Кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $r = 0.01$



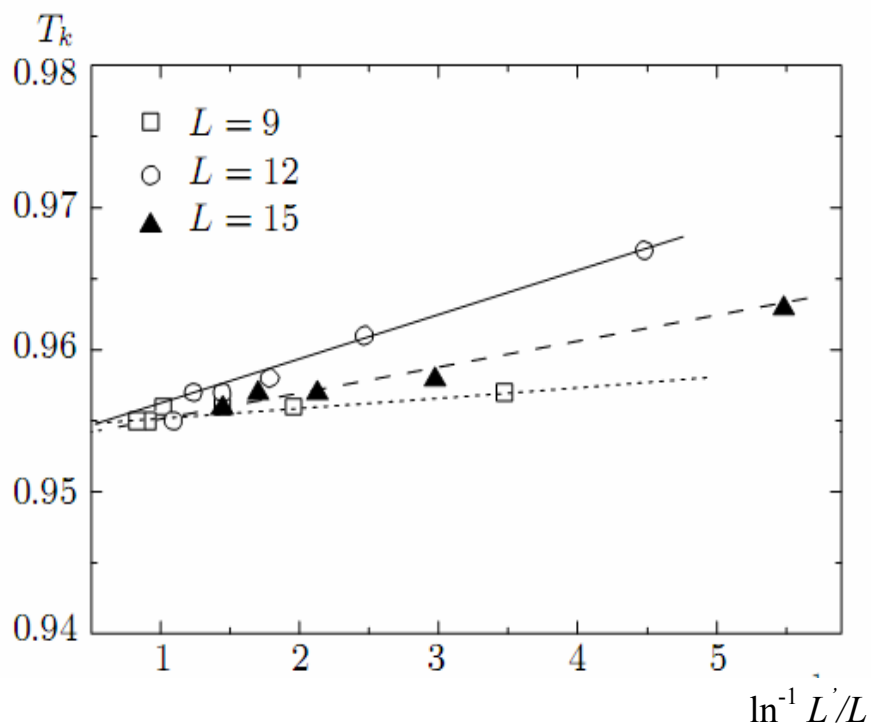


Рис. 2.6. Зависимость температуры  $T_k$  от величины  $\ln^{-1}(L'/L)$  для разных  $L$  для  $r = 1$ .

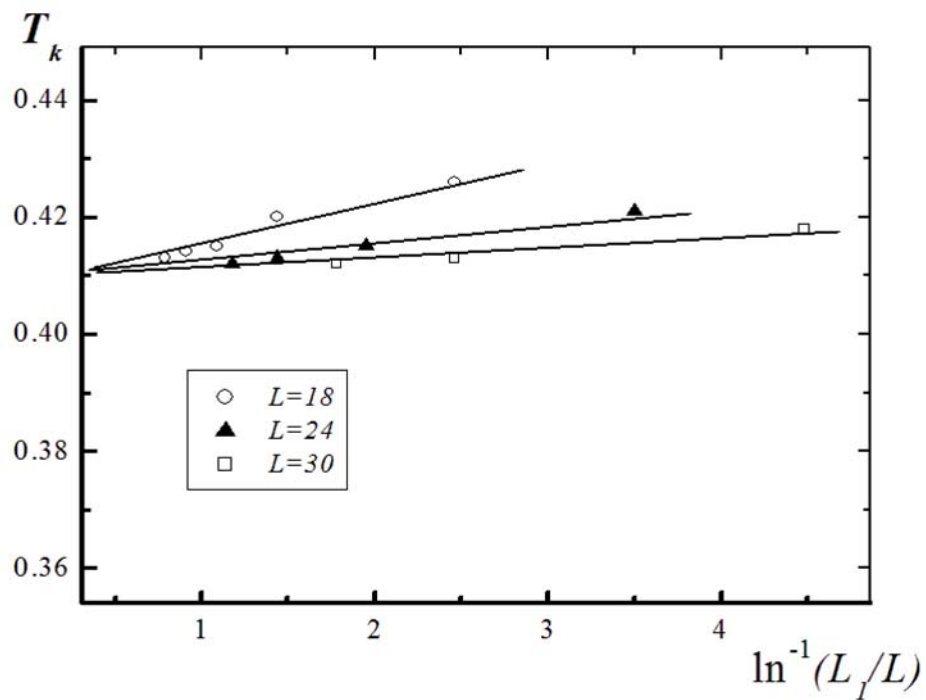


Рис. 2.7. Зависимость температуры  $T_k$  от величины  $\ln^{-1}(L'/L)$  для разных  $L$  для  $r = 0.05$ .

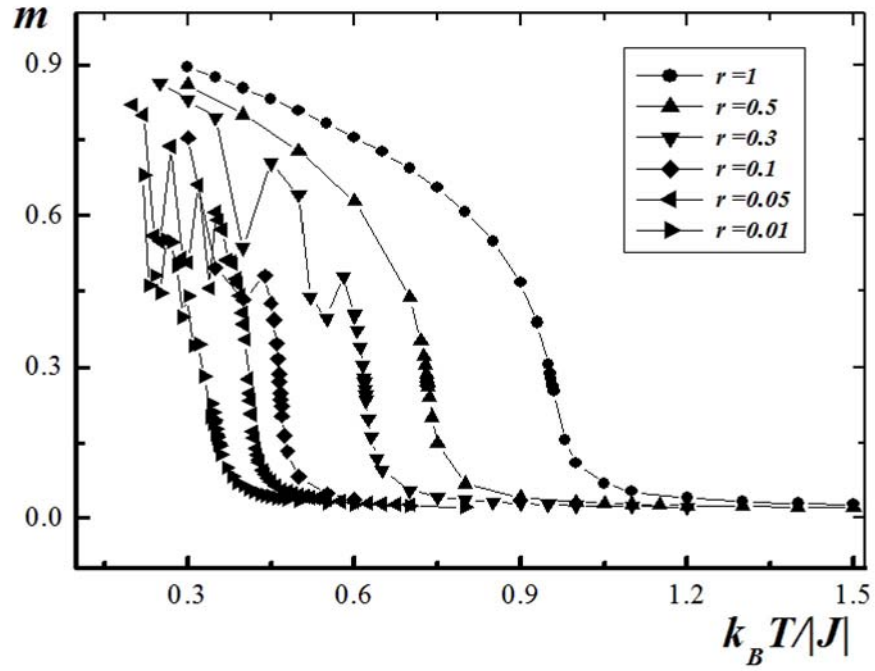


Рис.2.8. Зависимость магнитного параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для системы с  $L = 24$  для разных  $r$ .

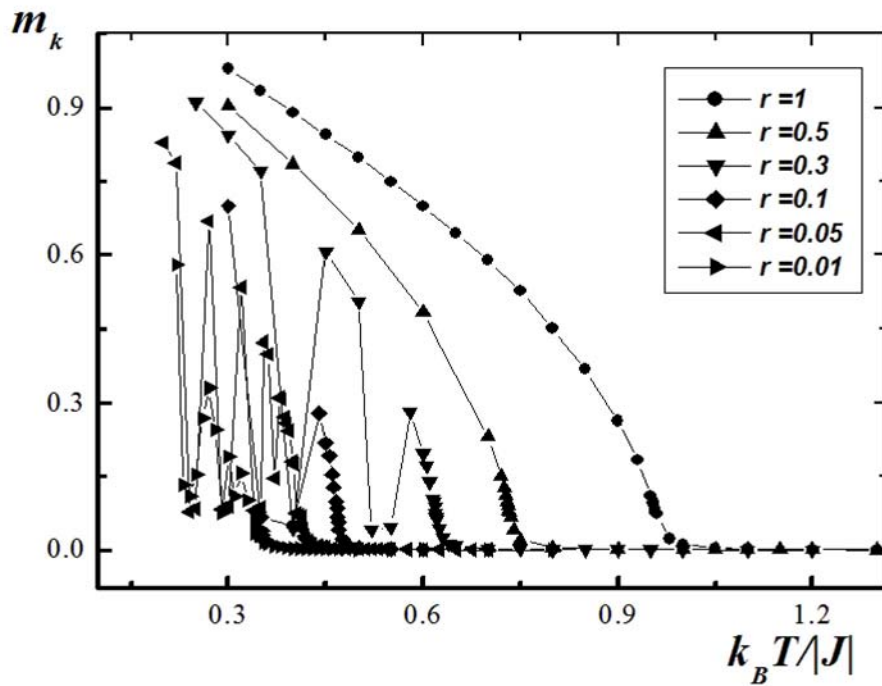


Рис.2.9. Зависимость кирального параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для системы с  $L = 24$  для разных  $r$ .

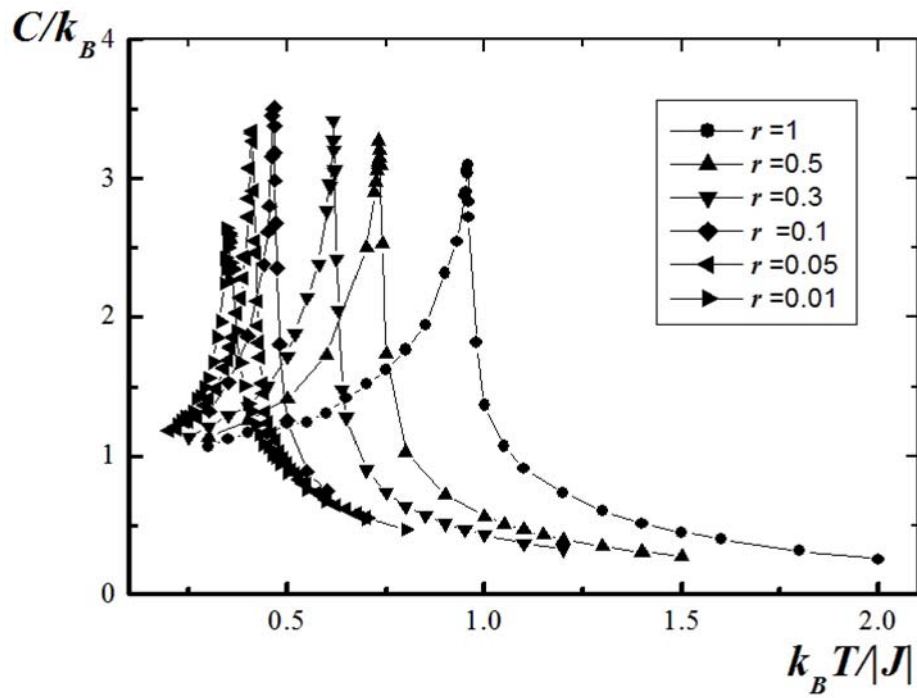


Рис.2.10. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L = 24$  для разных  $r$ .

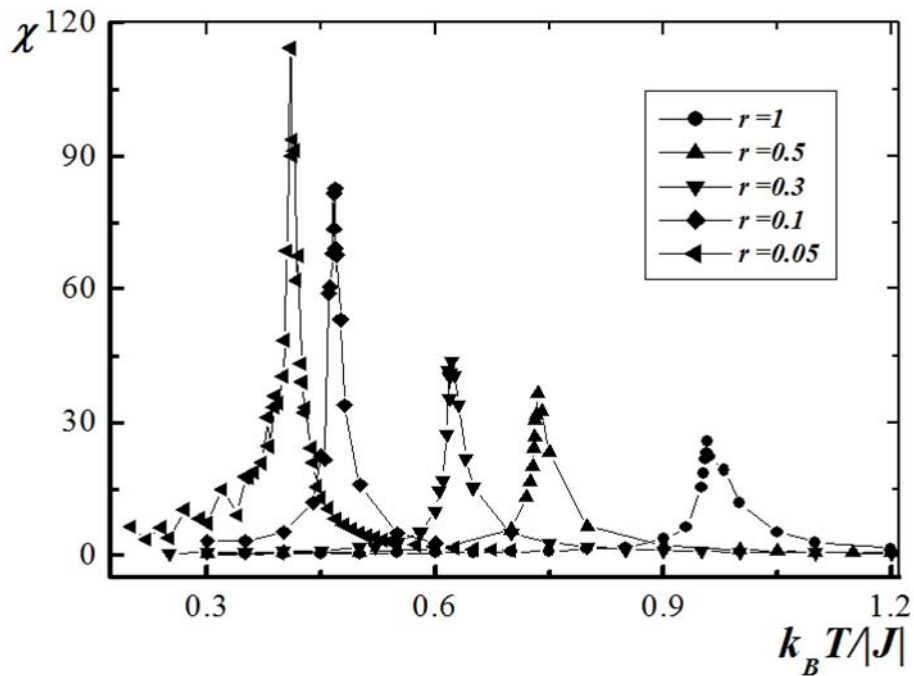


Рис.2.11. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/|J|$  для системы с  $L=24$  для разных  $r$ .

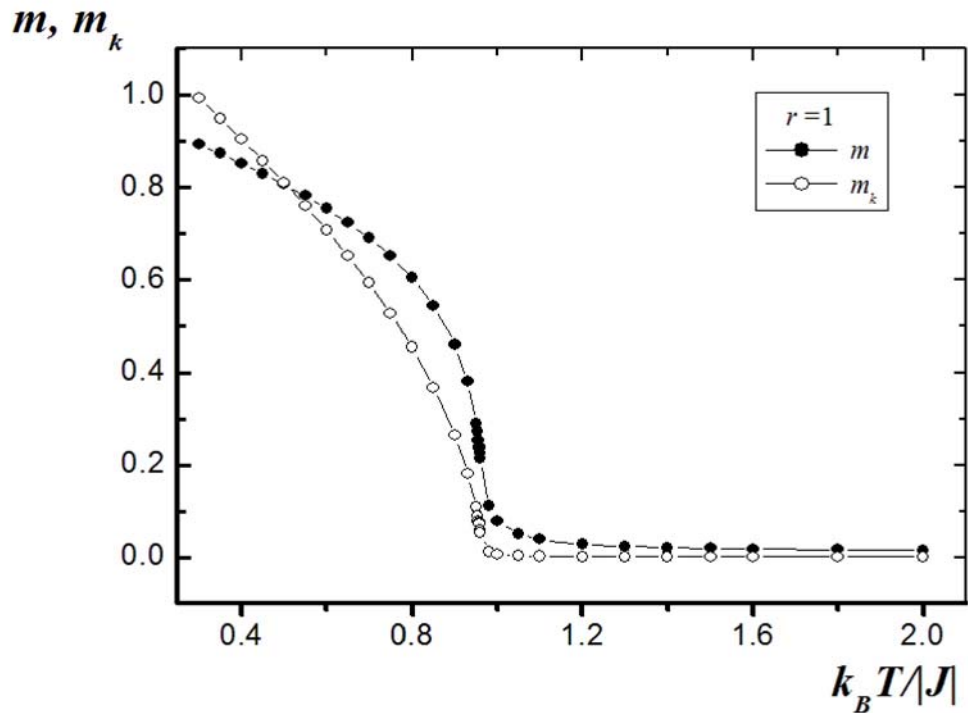


Рис.2.12. Зависимость магнитного и кирального параметров порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для системы с  $L=24$  для  $r=1$ .

Для расчета статических магнитных и киральных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  и индекса радиуса корреляции  $\nu$  и  $\nu_k$  использовались соотношения теории конечно-размерного скейлинга. Из соотношений КРС следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T=T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие выражения (2.32), (2.33), (2.34), (2.39), (2.51), (2.52), (2.54).

Критический индекс радиуса корреляции был определен нами тремя способами. На рис.2.13 и 2,14 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров  $V_i$  для  $i=1; 2; 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $r = 0.8$  и  $r = 0.05$ . Как видно из рисунков, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Кривые на рисунке проведены в соответствии с методом

наименьших квадратов. Угол наклона прямой определяет значения  $1/\nu$ . Как видно из рисунка эти прямые расположены параллельно друг другу. Это означает, что эти прямые расположены под одинаковым углом и значения критических индексов, определенные тремя способами, практически совпадают.

На рис.2.15-2.24 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость теплоемкости  $C$ , магнитного и кирального параметра порядка  $m$  и  $m_k$ , восприимчивости  $\chi$  и  $\chi_k$  от линейных размеров решетки  $L$  при  $r = 0.8$  и  $r = 0.05$ . Отметим, что наблюдается линейная зависимость, все точки в пределах погрешности ложатся на прямую. Угол наклона этих прямых определяет значения  $\alpha/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ . По этой схеме имея ранее определенные значения  $\nu$  и  $\nu_k$ , вычислялись все основные статические магнитные и киральные критические индексы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\beta_k$ , и  $\gamma_k$ . Эта процедура использовалась для расчета индексов и при значениях  $r = 0.01; 0.075; 0.1; 0.3; 0.6; 1$ . Обратим внимание на то, что индексы  $\nu$  и  $\nu_k$  используемые для расчета других индексов вычислены нами в рамках единого исследования, тогда как очень часто в качестве  $\nu$  и  $\nu_k$  используют значения, полученные для простых модельных систем при  $R = 0.0$  (например, для модели Гейзенберга и т.д.). Все значения магнитных и киральных критических индексов полученные нами таким образом представлены в таблицах 2.2 и 2.3.

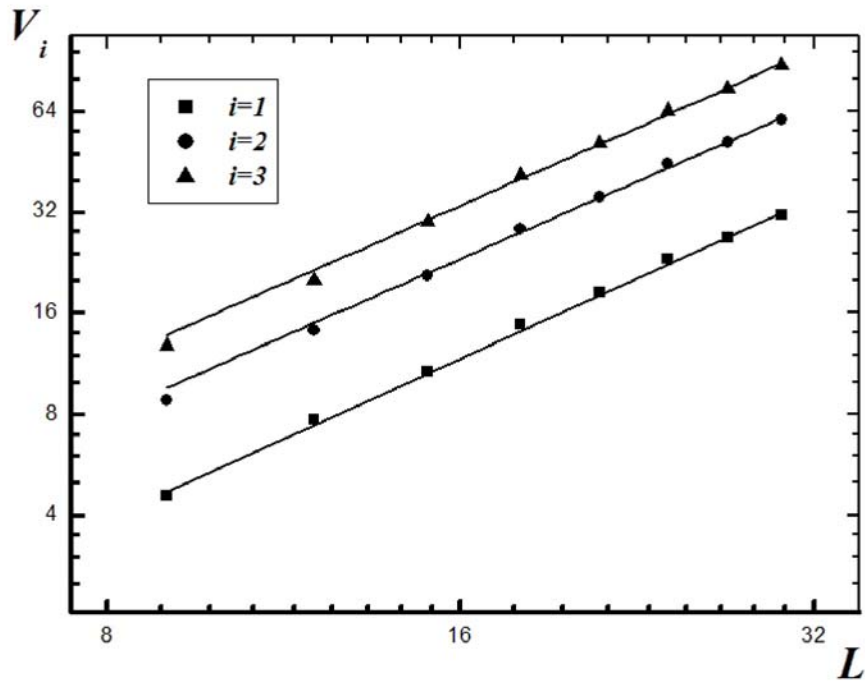


Рис.2.13.Зависимость параметров  $V_i$  от линейных размеров системы при  $T = T_N$  для  $r = 0.8$ .

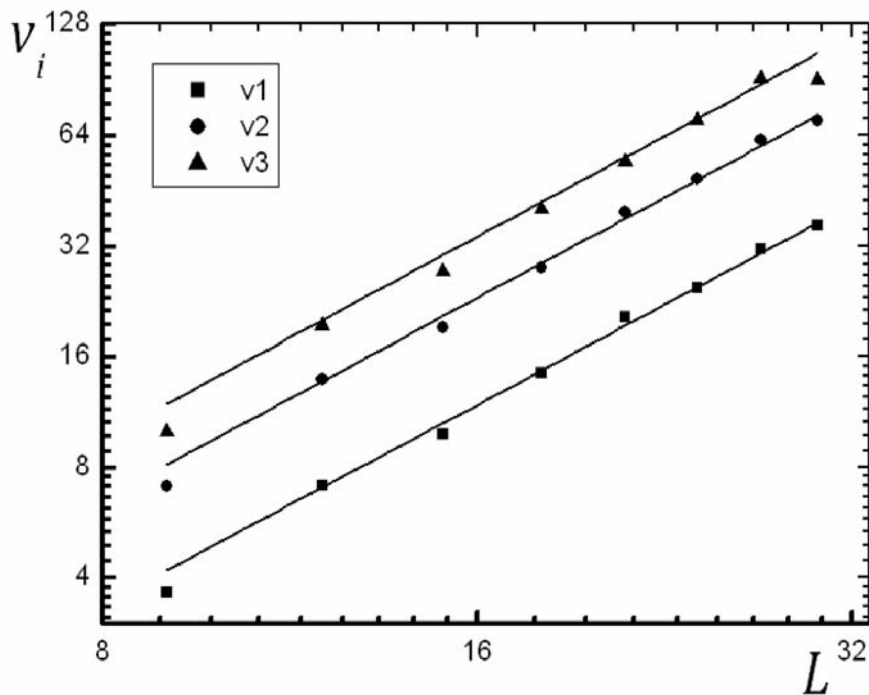


Рис.2.14.Зависимость параметров  $V_i$  от линейных размеров системы при  $T = T_N$  для  $r = 0.05$ .

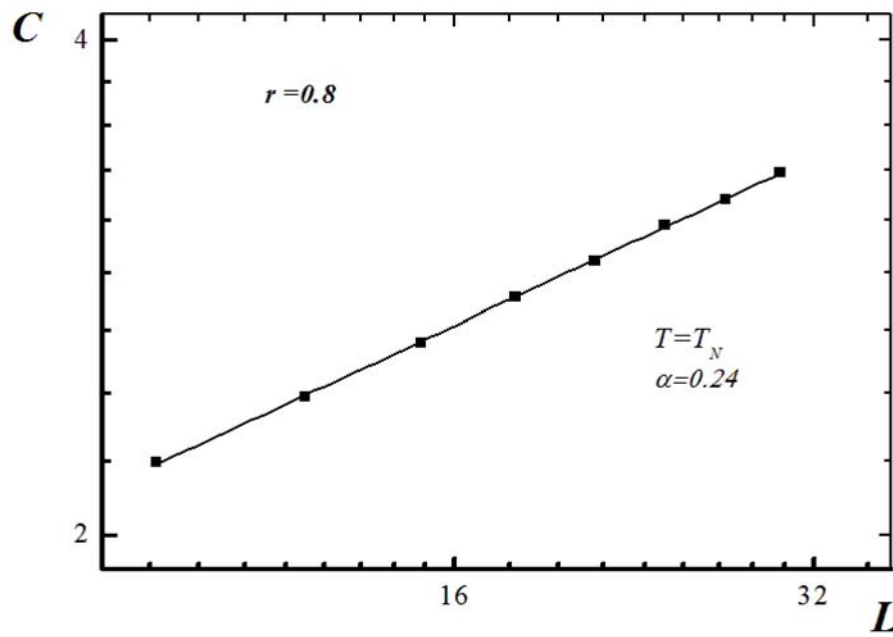


Рис.2.15. Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r = 0.8$ .

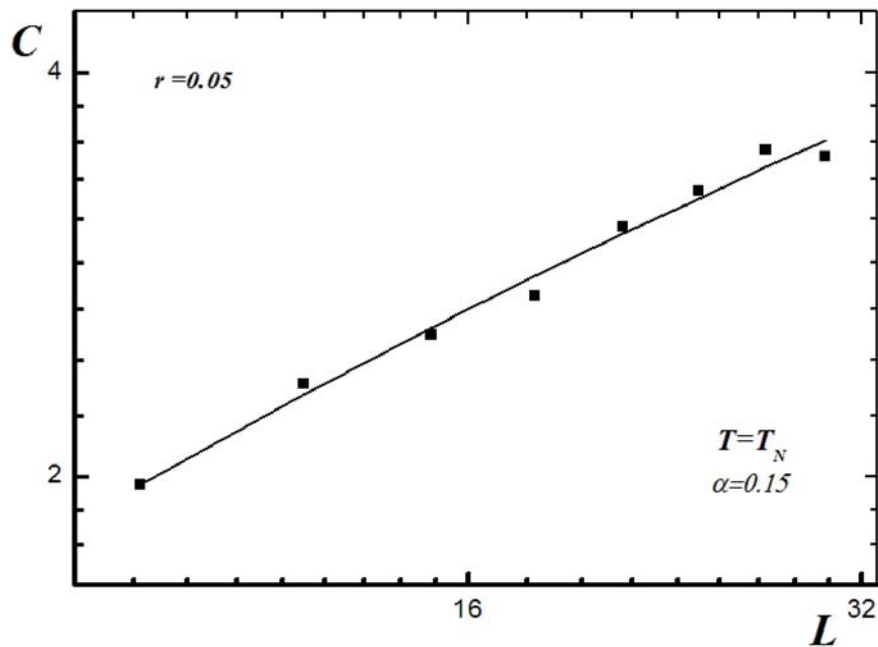


Рис.2.16. Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r = 0.05$ .

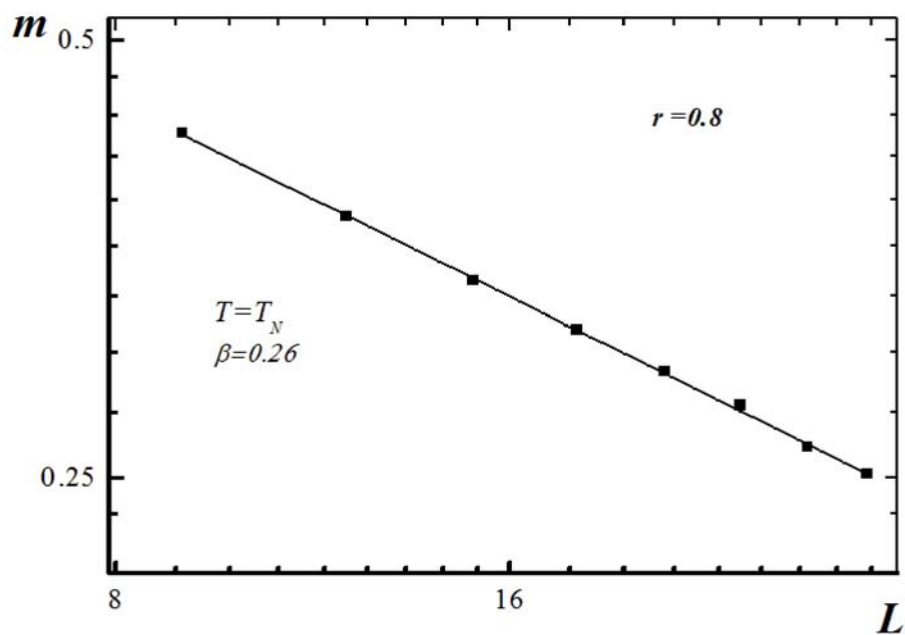


Рис.2.17. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r=0.8$ .

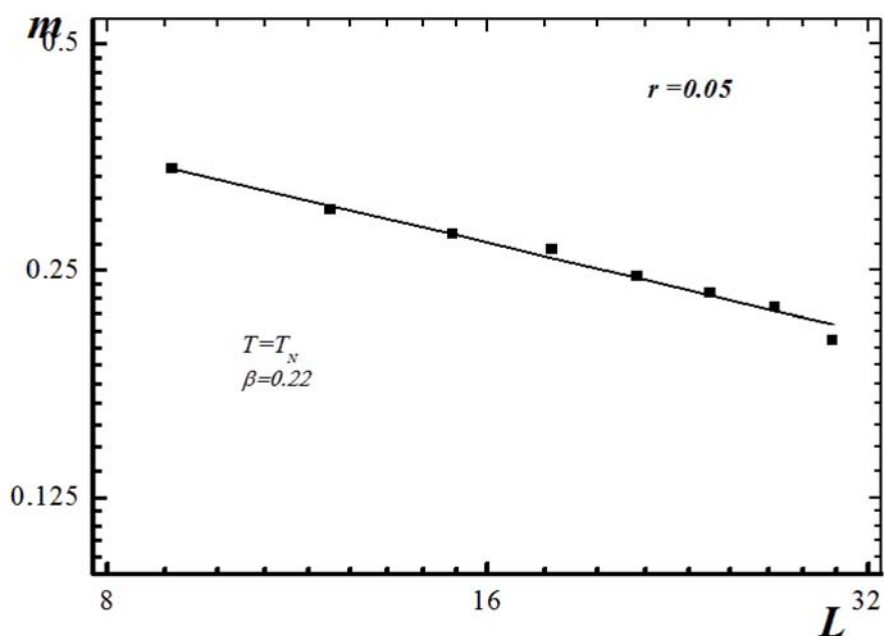


Рис.2.18. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r=0.05$ .



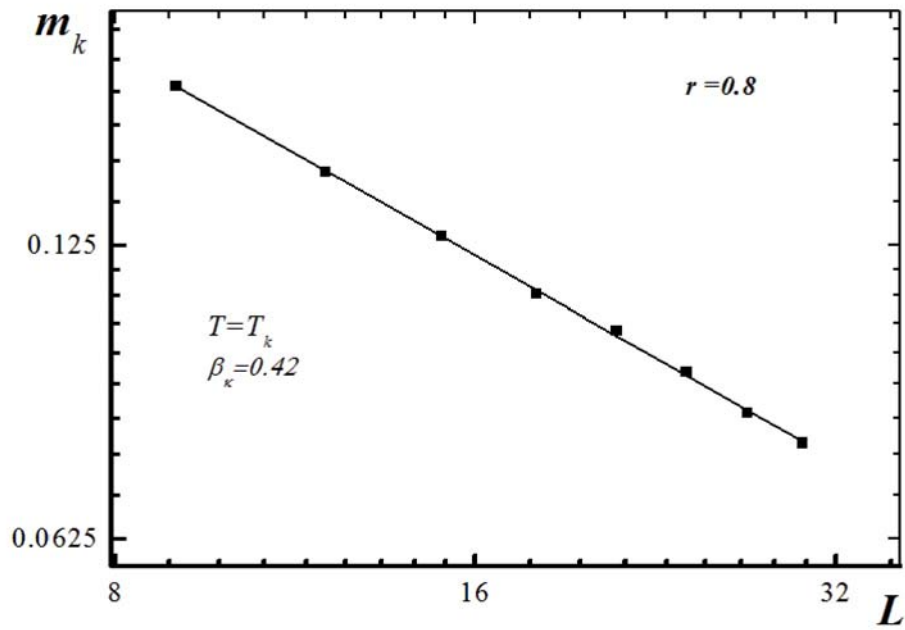


Рис.2.19. Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r=0.8$ .

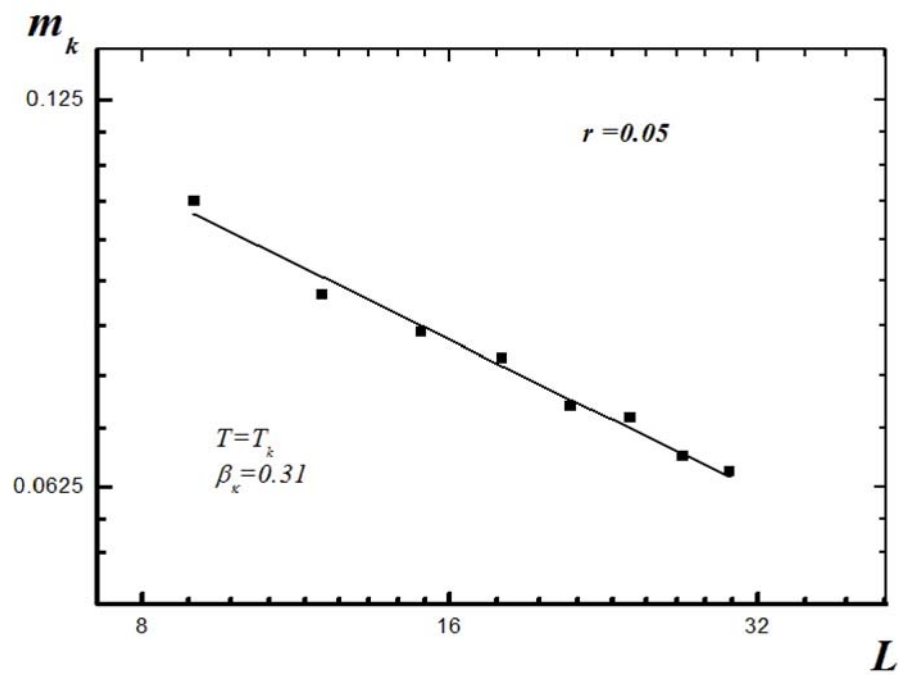


Рис.2.20. Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r=0.05$ .

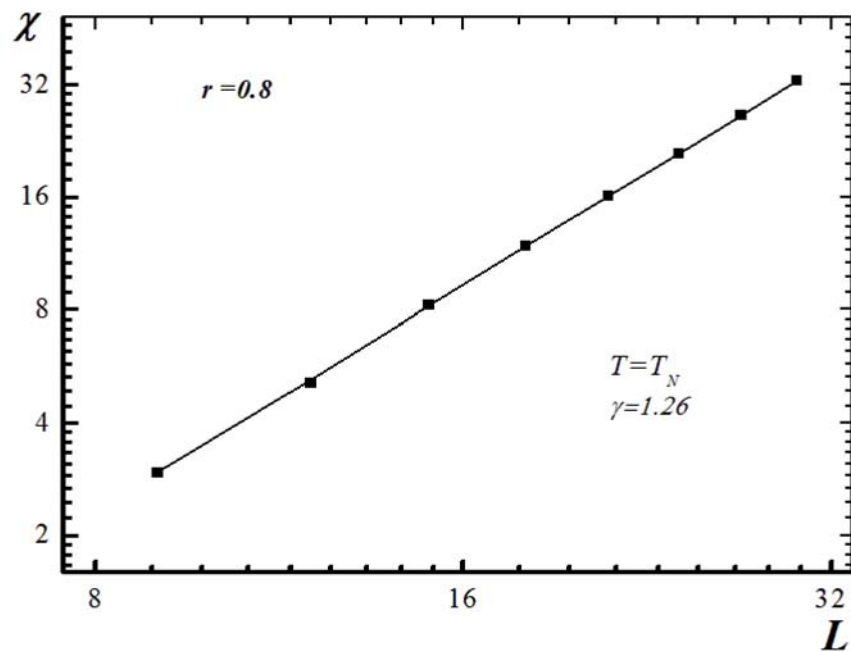


Рис.2.21. Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $r=0.8$ .

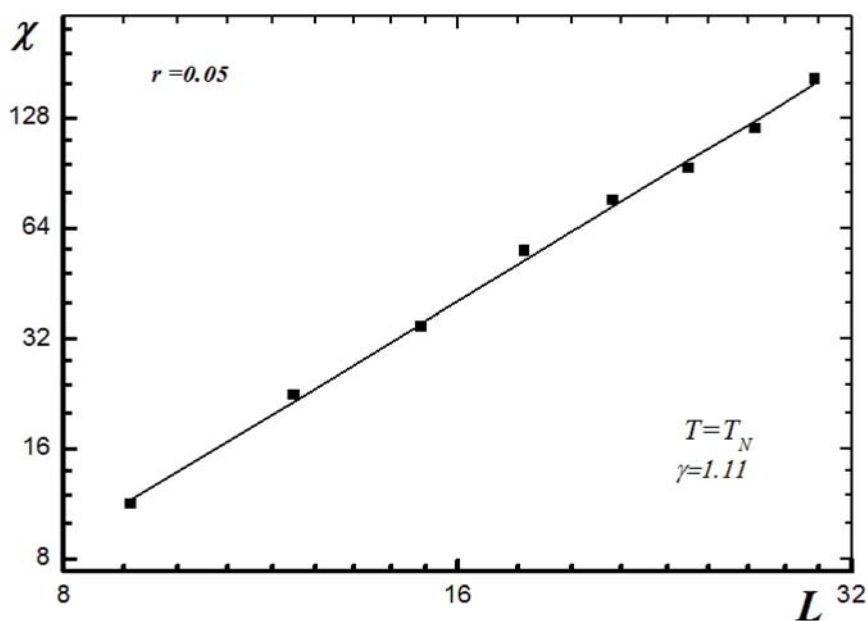


Рис.2.22. Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_C$  для  $r=0.05$ .

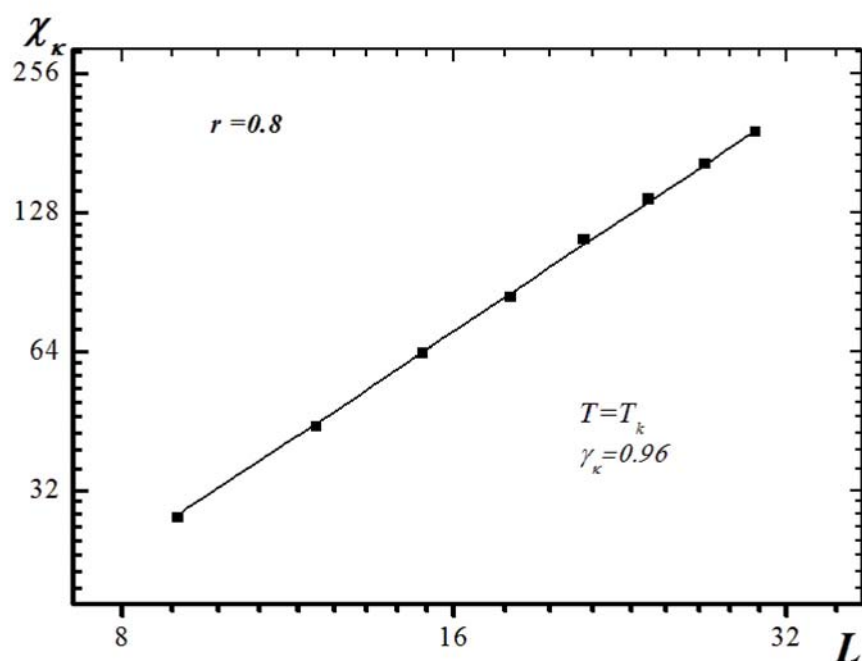


Рис.2.23. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_k$  для  $r=0.8$ .

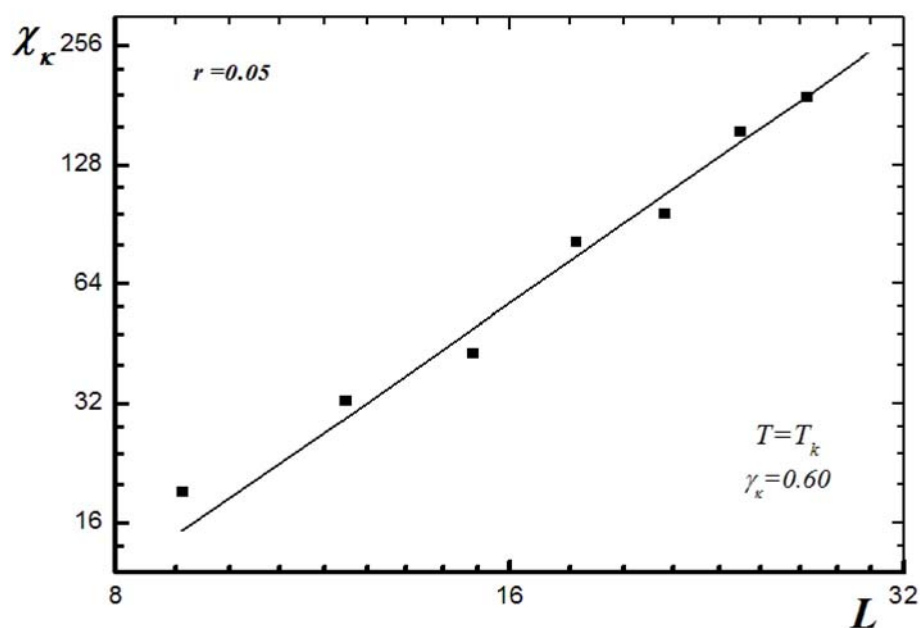


Рис.2.24. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_k$  для  $r=0.05$ .

Таблица 2.2.

Значения магнитных критических параметров для модели  
Гейзенберга для разных  $r$ .

$r$	$T_N$	$\nu$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\alpha+2\beta$ $+\gamma=2$
1	0.956(1)	0.59(2)	0.26(2)	0.27(2)	1.23(3)	2.03
0.8	0.872	0.60	0.24	0.26	1.26	2.02
0.6	0.783	0.59	0.22	0.29	1.22	2.02
0.3	0.619	0.60	0.26	0.29	1.23	2.07
0.1	0.468	0.59	0.24	0.28	1.17	1.97
0.075	0.442	0.55	0.26	0.24	1.23	1.97
0.05	0.413	0.55	0.15	0.22	1.11	1.70
0.01	0.353	0.48	0.09	0.27	0.82	1.45

Таблица 2.3.

Значения киральных критических параметров для модели  
Гейзенберга для разных  $r$ .

$r$	$T_k$	$\nu_k$	$\alpha$	$\beta_k$	$\gamma_k$	$\alpha+2\beta_k$ $+\gamma_k=2$
1	0.956(2)	0.59(2)	0.26(2)	0.43(2)	0.87(3)	1.99
0.8	0.872	0.60	0.24	0.42	0.96	2.04
0.6	0.783	0.59	0.22	0.46	0.85	1.99
0.3	0.619	0.60	0.26	0.48	0.81	2.03
0.1	0.468	0.59	0.24	0.47	0.82	2
0.075	0.442	0.55	0.26	0.42	0.87	1.97
0.05	0.413	0.55	0.15	0.31	0.60	1.37
0.01	0.353	0.48	0.09	0.40	0.52	1.41

Как видно из таблиц 2.2 и 2.3 значения критических индексов для разных значений  $r$  в пределах изменения от  $r = 1.0$  до  $r = 0.075$  практически не зависят от  $r$  и в пределах погрешности совпадают. При этом соотношения скейлинга между критическими индексами  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  выполняется с достаточно высокой степенью точности. Однако, как только  $r$  становится меньше 0.075, мы наблюдаем резкое изменение значений всех индексов. Это изменение сопровождается и нарушением скейлингового соотношения между индексами  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\beta_k$ ,  $\gamma$  и  $\gamma_k$ . Таким образом, характер критического поведения этой модели не меняется в пределах изменения  $r$  от 1.0 до 0.075. По видимому, значения  $r = 0.075$  можно считать границей, после которой в системе начинается происходить кроссовер от 3D – критического поведения к квазидвумерному.

## **ГЛАВА III. МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ.**

### **§ 3.1. Критическое поведение фрустрированной модели Гейзенберга с различными типами межплоскостного обменного взаимодействия.**

Проблемы исследования ФП и КЯ в фрустрированных спиновых системах, в последние годы, стала одной из актуальных проблем теории ФП. Оживленную дискуссию, например, вызвал вопрос о зависимости критического поведения фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке от знака межплоскостного обменного взаимодействия.

В данной работе, нами предпринята попытка по возможности с максимальной точностью, с соблюдением единой методики, с использованием надежной и проверенной схемы, на основе специального репличного алгоритма метода МК определить значения критических параметров трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке с ферро- и антиферромагнитным межслойным обменным взаимодействием.

Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде [10]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J' \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (3.1)$$

где  $\vec{S}_i$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J$  и  $J'$  – константы обменного взаимодействия. Суммирование проводится по ближайшим соседям. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси.

Первый член в формуле (3.1) характеризует внутривекторное обменное взаимодействие спинов  $J$ , а второй – межвекторное  $J'$ . Фрустрации в этой модели обусловлены геометрией решетки [10].

Исследования методом МК магнитных и общетермодинамических свойств этой модели выполнены в работе [10]. Показано, что в этой системе наблюдается фазовый переход второго рода при  $T_N=0.954$ . В этой работе были рассчитаны и некоторые магнитные статические критические индексы.

В работе [9] авторы обнаружили, что температуры магнитного и кирального упорядочения совпадают  $T_N=T_k=0.957(2)$ , но физические причины такого поведения им пока неизвестны. Кроме того, результаты исследований, полученные в работах [8,10,11] носят весьма противоречивый характер, что требует проведения дополнительных более точных исследований этой модели.

Тем не менее, данные этих работ свидетельствуют об отличии критических параметров фрустрированной 3d модели Гейзенберга от значений характеризующих класс универсальности чистой модели Гейзенберга.

Неколлинеарная структура основного состояния фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке задается киральным параметром порядка. Считается, что наличие такого порядка может привести к ФП второго рода с новым киральным классом универсальности. Об этом свидетельствуют подавляющее большинство численных и экспериментальных данных [116,127-133]. Имеющиеся результаты теоретических исследований не проясняют сложную картину. Часть результатов свидетельствуют о наличии в таких системах ФП второго рода при определенных значениях числа компонентов параметра порядка  $N$ , а часть – в пользу наличия слабо выраженного фазового перехода первого рода [134 - 136].

Кроме того, остается открытым важный вопрос, связанный с зависимостью класса универсальности критического поведения ФС от типа межслойного обменного взаимодействия, анизотропии, учета взаимодействия вторых ближайших соседей, внешнего магнитного поля, величины внутри- и межслойного обменного взаимодействия и др. [130 - 135].

Изучение фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке с ферро- и антиферромагнитным межслойным обменным взаимодействием позволит получить ответ на вопрос, связанный с зависимостью критического поведения ФС от типа межслойного обменного взаимодействия.

Результаты исследования магнитных и общетермодинамических свойств данной модели представлены нами в работе [137]. В этой работе также рассчитаны значения критических индексов обычным способом, без учета коррекции к скейлингу.

Для выяснения влияния типа межплоскостного обменного взаимодействия на характер критического поведения рассмотрены две модели – D1 и D2:

Модель D1 –  $J < 0, J' > 0, |J| = |J'|$ .

Модель D2 –  $J < 0$  и  $J' < 0, |J| = |J'|$ .

В данном исследовании нами использовался высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло в следующем виде.

1. Одновременно моделируются две реплики  $X$  и  $X'$  с разными температурами  $T$  и  $T'$ .
2. После выполнения 100 МК-шагов на спин эти реплики обмениваются данными в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X \rightarrow X') = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0, \end{cases}$$



где  $\Delta = (U - U') \cdot (1/T - 1/T')$ ,  $U$  и  $U'$  - внутренняя энергия первой и второй реплики соответственно.

Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности очень не эффективно и отнимает много времени. Этот метод нами был апробирован для исследования других более простых моделей [10, 126, 129]. Кроме того, репличный обменный алгоритм облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12 \div 42$ . При каждом конкретном значении  $L$  для усреднения термодинамических параметров использовались 20 марковских цепей стартовых из различных случайных начальных конфигураций. В каждой цепи длина равновесного участка в 100 раз превышала длину неравновесного. Полученные таким образом значения термодинамических параметров усреднялось по всем 20 конфигурациям.

Для построения графиков зависимости термодинамических параметров от температуры использовались соотношения (2.56; 2.57; 2.58; 2.61).

На рис. (3.1 3.2, 3.7 и 3.8) представлены характерные зависимости магнитного и кирального параметров порядка от температуры для систем с линейными размерами  $L = 9 - 30$  для модели  $D1$  и  $D2$ . Отметим, что эти рисунки демонстрируют возникновения, как магнитного, так и кирального упорядочения при низких температурах. С ростом температуры параметры порядка  $m$  и  $m_k$  плавно уменьшаются. При приближении критической температуре происходит резкий спад. Можно отметить, что в высокотемпературной фазе для параметра  $m$  при малых значениях

линейных размеров системы  $L$  наблюдаются заметные высокотемпературные «хвосты», которые с ростом  $L$  становятся существенно меньше. Аналогичные эффекты для кирального параметра порядка выражены меньше. По данным представленным на этих рисунках можно отметить, что температуры фазовых переходов для обоих параметров совпадают или очень близки.

На рис.3.3 и 3.9 представлены характерные зависимости Кумулянтов Биндера  $U_L$  от температуры для моделей  $D1$  и  $D2$  для разных значений  $L$ . Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. Из графиков видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения  $T_N=0.956(\pm 1)$ .

Температурные зависимости для теплоемкости, восприимчивости и киральной восприимчивости для обеих моделей представлены на рисунках 3.4, 3.5, 3.6, 3.10 и 3.11. Отметим, что на зависимостях теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  от температуры, для обеих моделей, вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением  $L$ . Это свидетельствует, во – первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во – вторых, о достижении насыщения по  $N$  для многих исследуемых нами параметров.

Так же мы на рисунках 3.12, 3.13, 3.14, 3.15 и 3.16 привели сравнения температурных зависимостей для обеих моделей. На этих рисунках мы замечаем достаточно хорошее согласие графиков. Максимумы этих зависимостей так же приходятся на одну и ту же температуру.

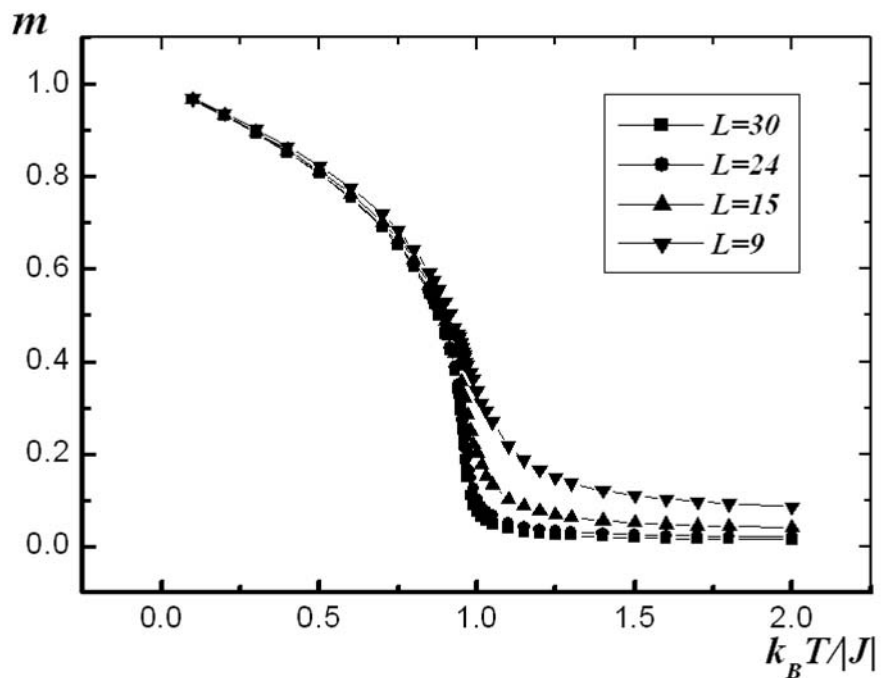


Рис.3.1. Зависимость магнитного параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $DI$ .

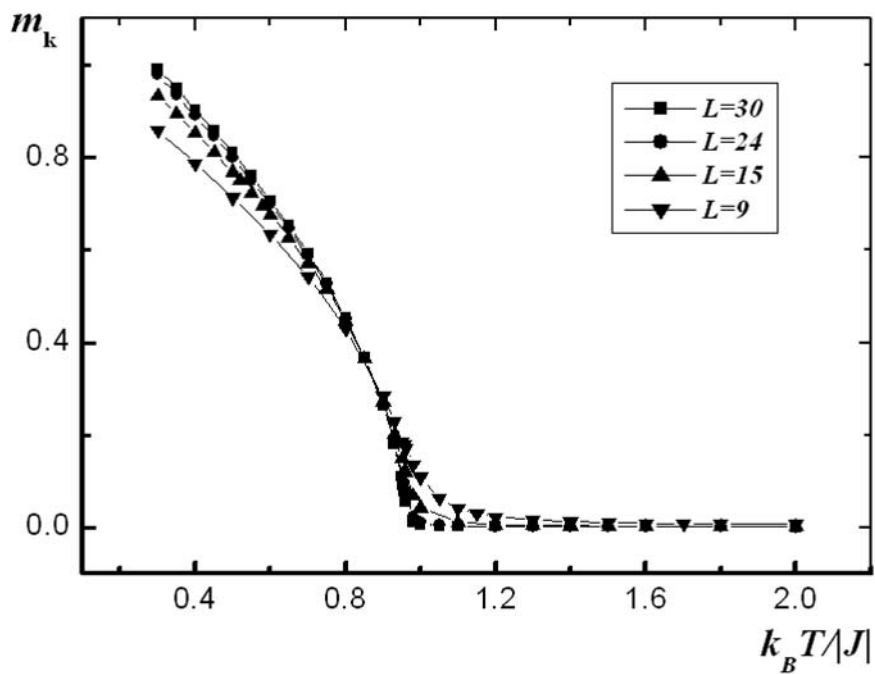


Рис.3.2. Зависимость кирального параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $DI$ .

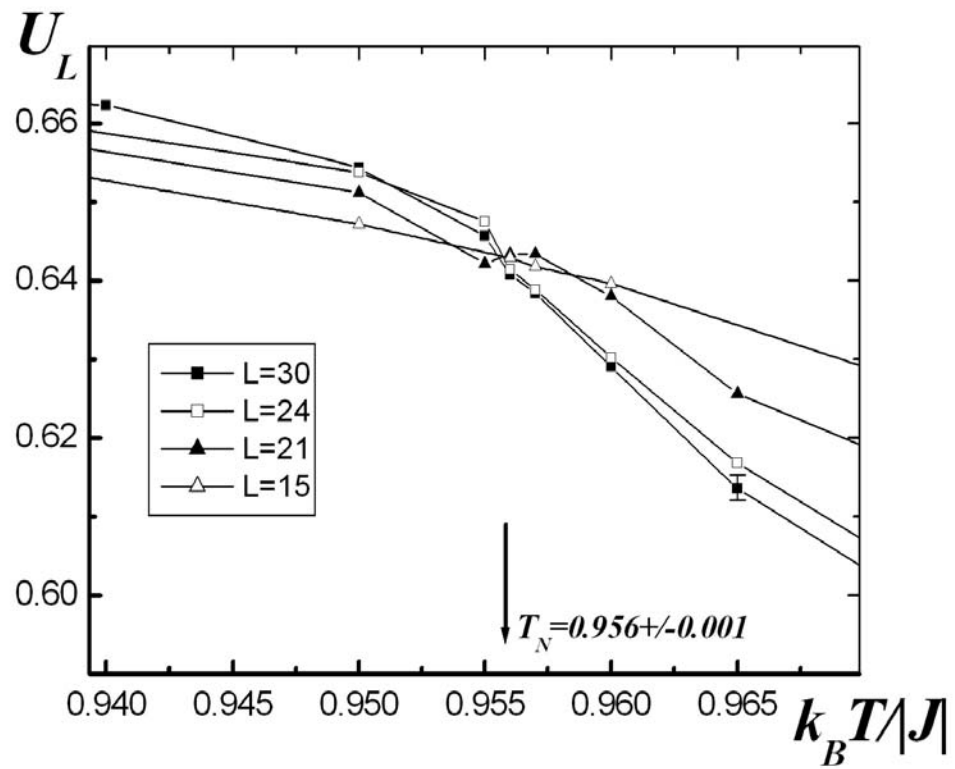


Рис.3.3. Зависимость кумулянта биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $D1$ .

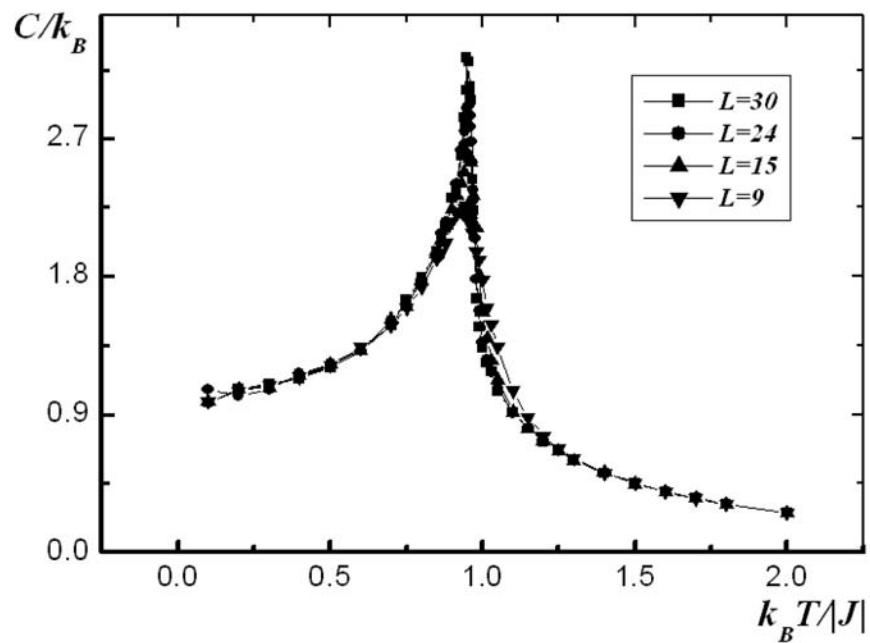


Рис.3.4. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $D1$ .

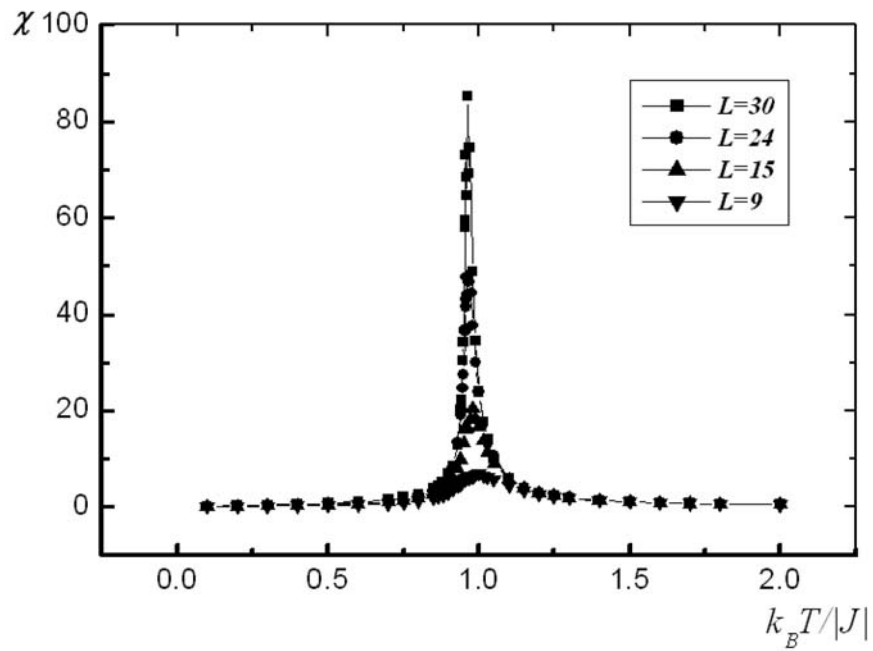


Рис.3.5. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $DI$ .

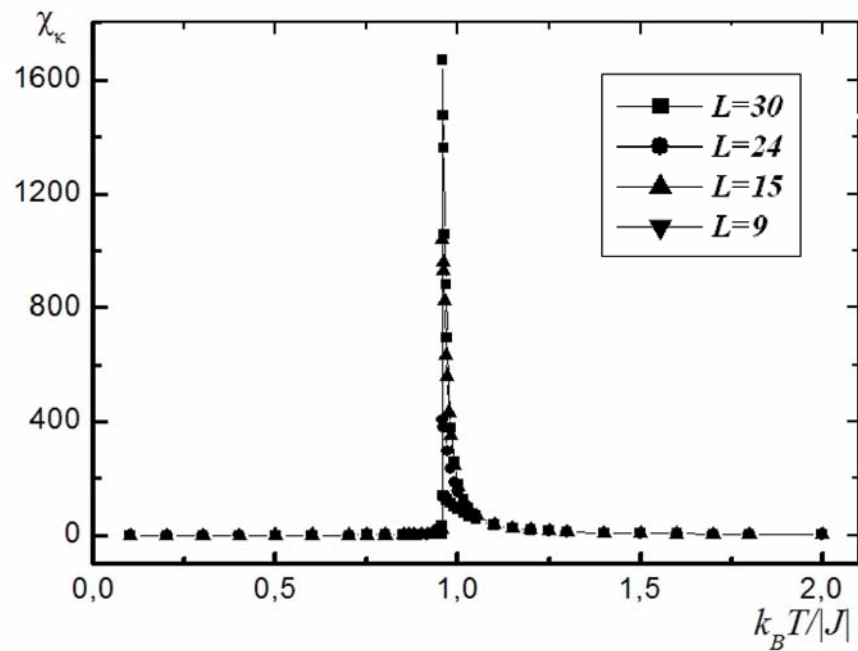


Рис.3.6. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от температуры  $k_B T / |J|$  для модели  $DI$ .

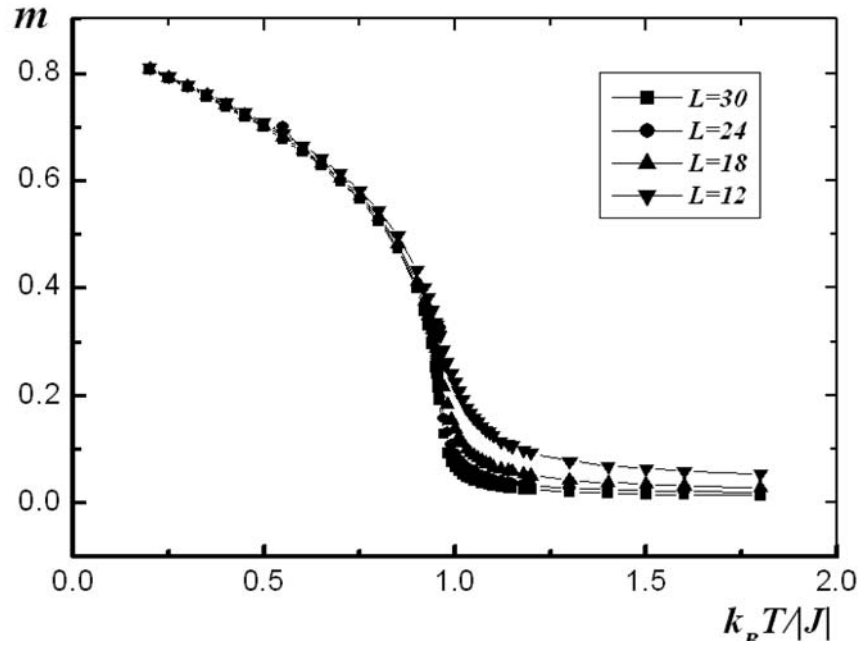


Рис.3.7. Зависимость магнитного параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для модели D2.

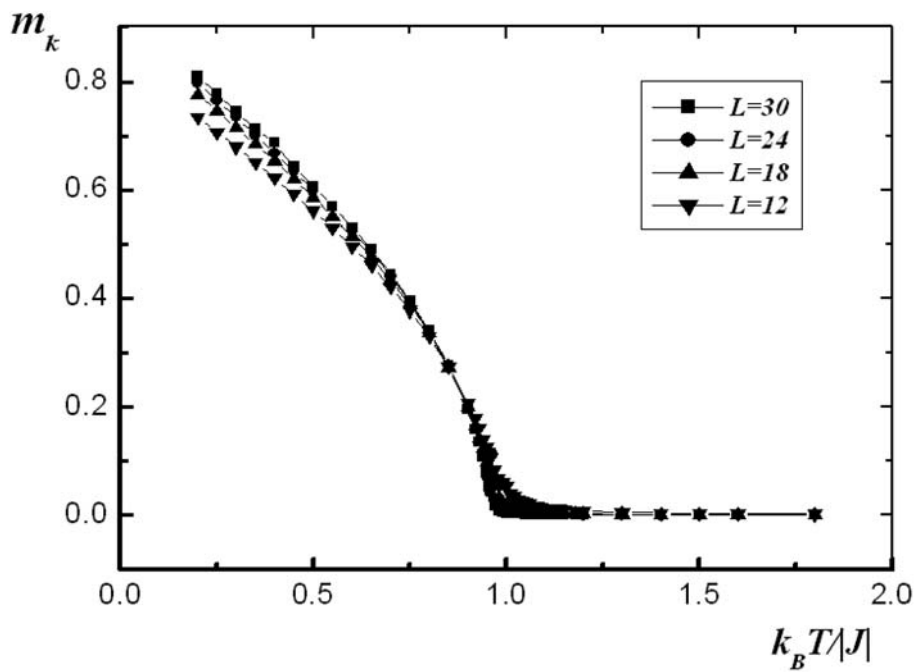


Рис.3.8. Зависимость кирального параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для модели D2.

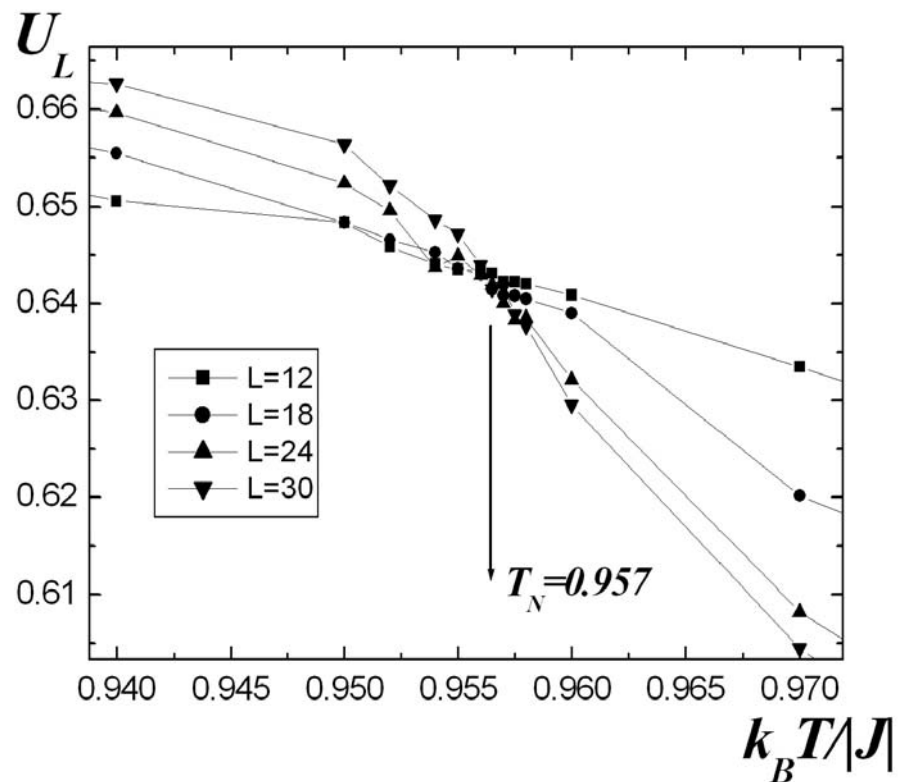


Рис.3.9. Зависимость кумулянта биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для модели D2.

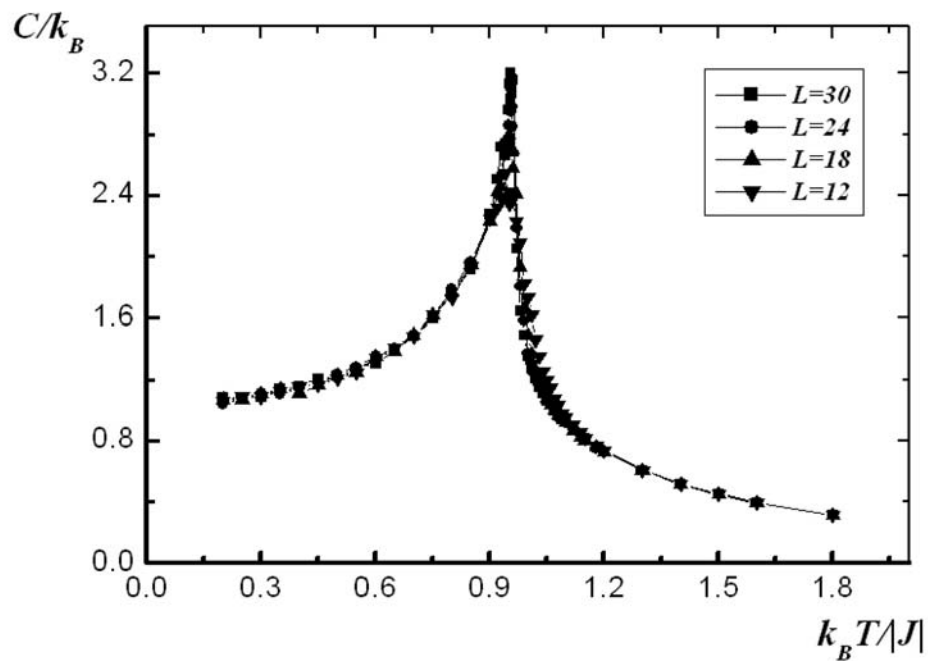


Рис.3.10. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T / |J|$  при  $L=12; 18; 24$  и  $30$  для модели D2.

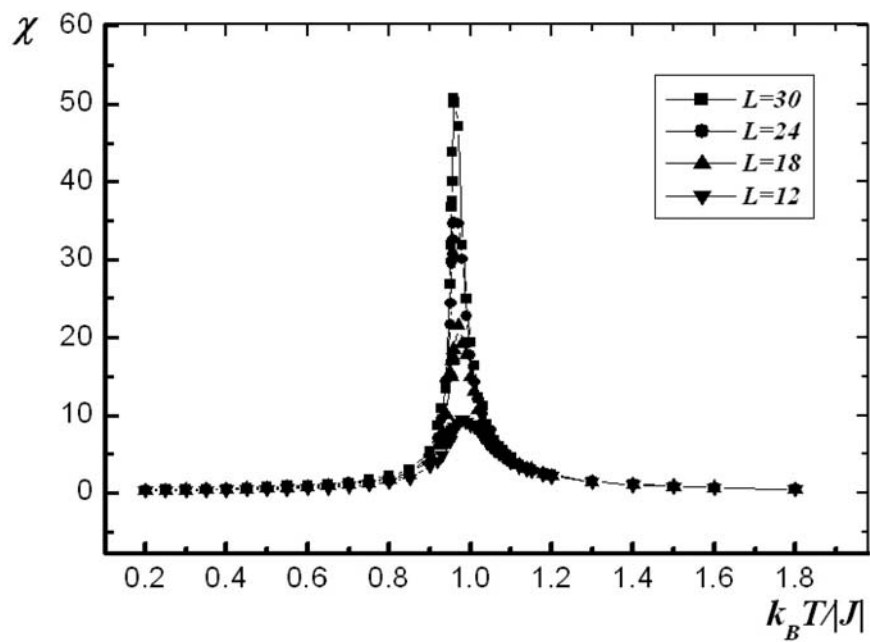


Рис.3.11. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $L=12; 18; 24$  и  $30$  для модели  $D2$ .

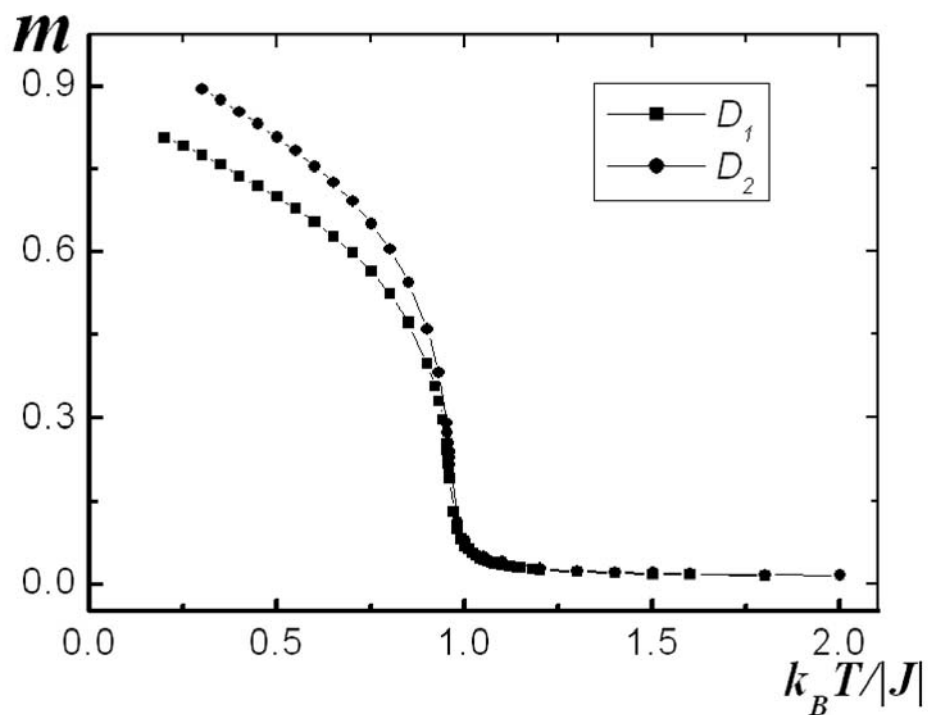


Рис.3.12. Зависимость магнитного параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  при  $L = 30$  для моделей  $D1$  и  $D2$ .



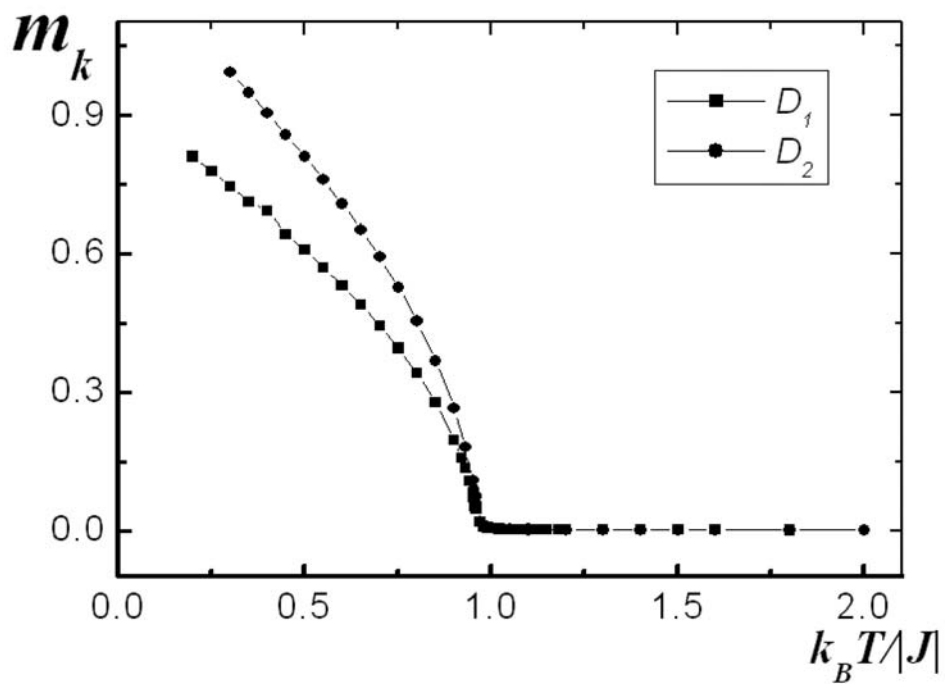


Рис.3.13. Зависимость кирального параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  при  $L = 30$  для моделей  $D1$  и  $D2$ .

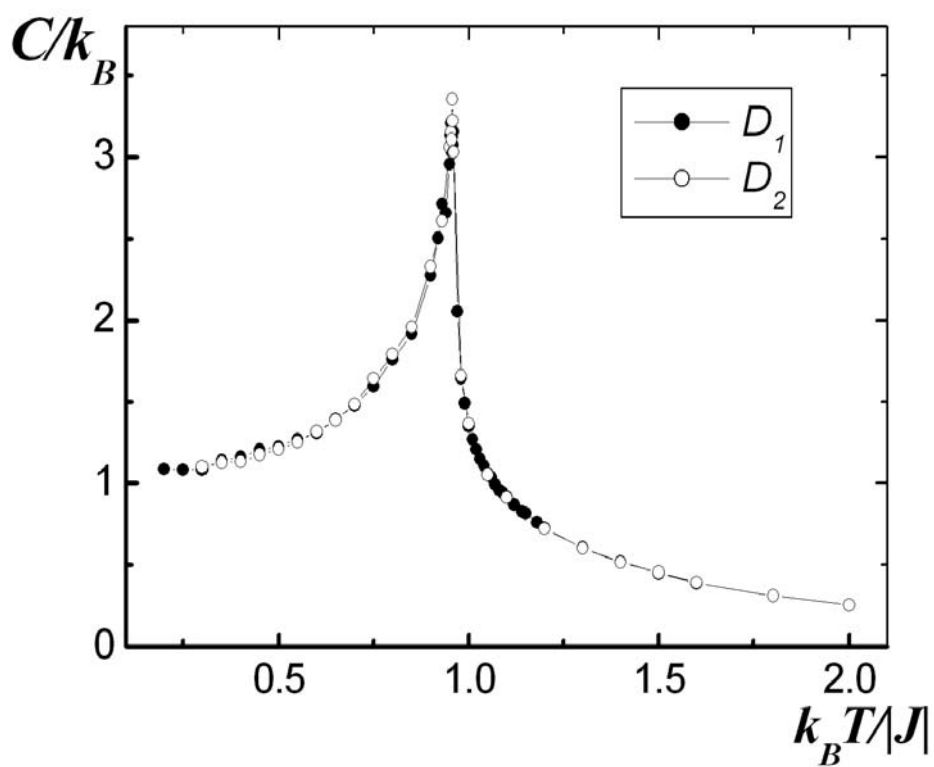


Рис.3.14. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $L = 30$  при моделях  $D1$  и  $D2$ .

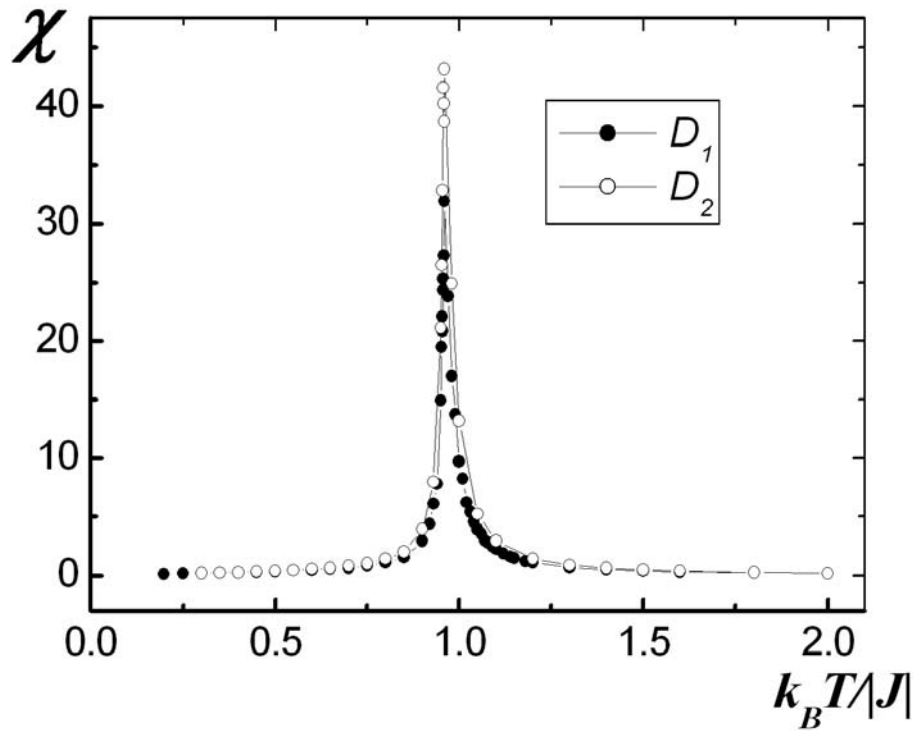


Рис.3.15. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T / |J|$  при  $L = 30$  для моделей

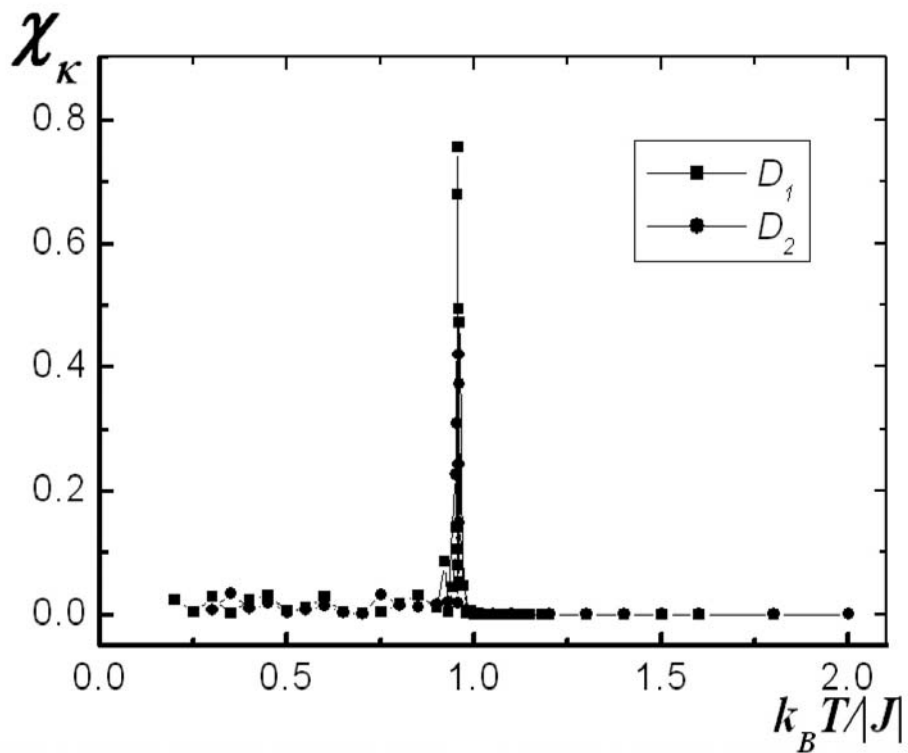


Рис.3.16. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от температуры  $k_B T / |J|$  при  $L = 30$  для моделей  $D1$  и  $D2$ .

### §3.2. Анализ результатов численного эксперимента.

Для расчета статических киральных и магнитных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$  используются соотношения теории конечно-размерного скейлинга. Анализ данных проводился с учетом коррекции к скейлингу.

Из соотношений КРС следует, что в системе с размерами  $LxLxL$  при  $T=T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие выражения [138-141]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu} [1 + b_1 L^{-\omega}], \quad (3.2)$$

$$m_k \sim L^{-\beta_k/\nu_k} [1 + b_2 L^{-\omega}], \quad (3.3)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} [1 + b_3 L^{-\omega}], \quad (3.4)$$

$$\chi_k \sim L^{\gamma_k/\nu_k} [1 + b_4 L^{-\omega}], \quad (3.5)$$

$$V_i \sim L^{\nu/\nu} g_{V_i} [1 + b_5 L^{-\omega}], \quad (3.6)$$

$$V_{ki} \sim L^{\nu/\nu_k} g_{V_i} [1 + b_6 L^{-\omega}], \quad (3.7)$$

где  $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6$  – амплитуды коррекции к скейлингу,  $\omega$  – индекс поправки к конечно-размерному скейлингу,  $g_{V_i}$  – некоторая постоянная, а в качестве  $V_i$  и  $V_{ki}$  могут выступать:

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i=1,2,3,4), \quad (3.8)$$

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{\langle m_k^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i=1,2,3,4). \quad (3.9)$$

Эти выражения были нами использованы для определения  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ ,  $\nu$  и  $\nu_k$ .

Аналогичное выражение для теплоемкости, как уже было показано в [60, 64] не работает и для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$  на практике для фрустрированных систем, как правило, используется следующее выражение [9, 11]:

$$C_{\max}(L) = C_1 + C_2 L^{\alpha/\nu}, \quad (3.10)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  - некоторые коэффициенты.

В качестве поправки к КРС нами использовалось значение  $\omega=0.78$ , которое соответствует для чистой модели Гейзенберга [138].

На рис. 3.17 и 3.23 представлены характерные зависимости параметра  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$ . Угол наклона прямой определяет значения  $1/\nu$ . Таким образом были вычислены значения критического индекса  $\nu$  для обеих моделей.

На рис. 3.18 - 3.22 и 3.24 – 3.28 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости теплоемкости  $\alpha$ , магнитного и кирального параметров порядка  $m$  и  $m_k$ , восприимчивости  $\chi$  и  $\chi_k$  от линейных размеров решетки  $L$  для модели  $D_1$  и для модели  $D_2$ . Как видно из рисунков все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Угол наклона прямой определяет значения  $\beta/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ . По этой схеме определены значения  $1/\nu$ ,  $1/\nu_k$  и  $\alpha/\nu$  для обеих моделей. Полученные в рамках данного исследования значения  $\nu$  и  $\nu_k$  использовались для определения  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\gamma$  и  $\gamma_k$  для моделей  $D_1$  и  $D_2$ .

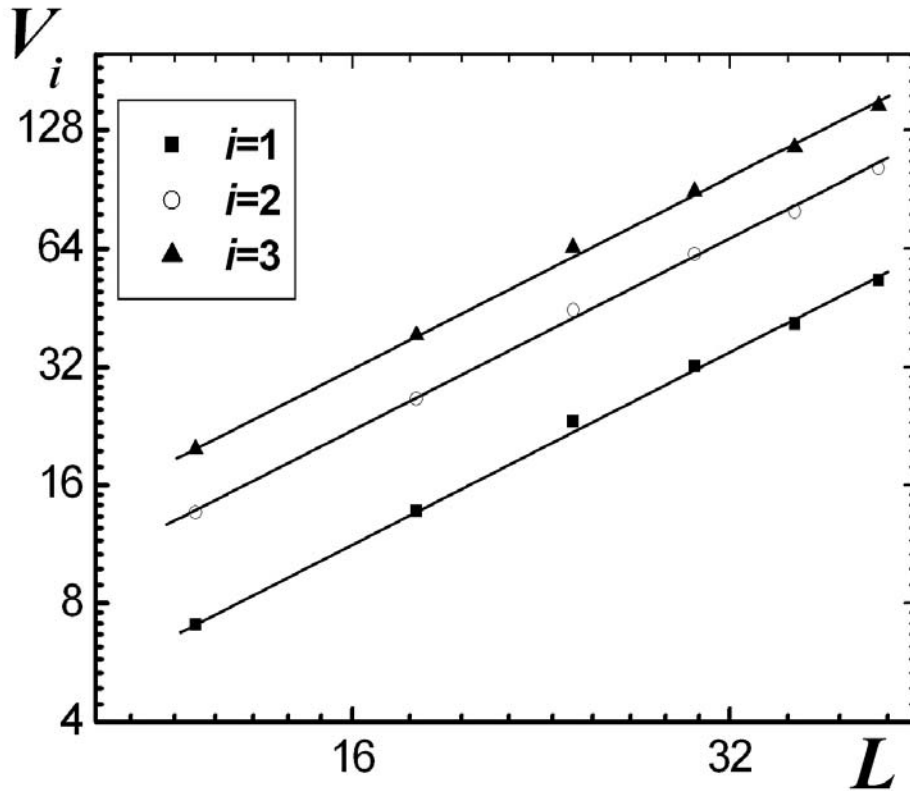


Рис.3.17. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

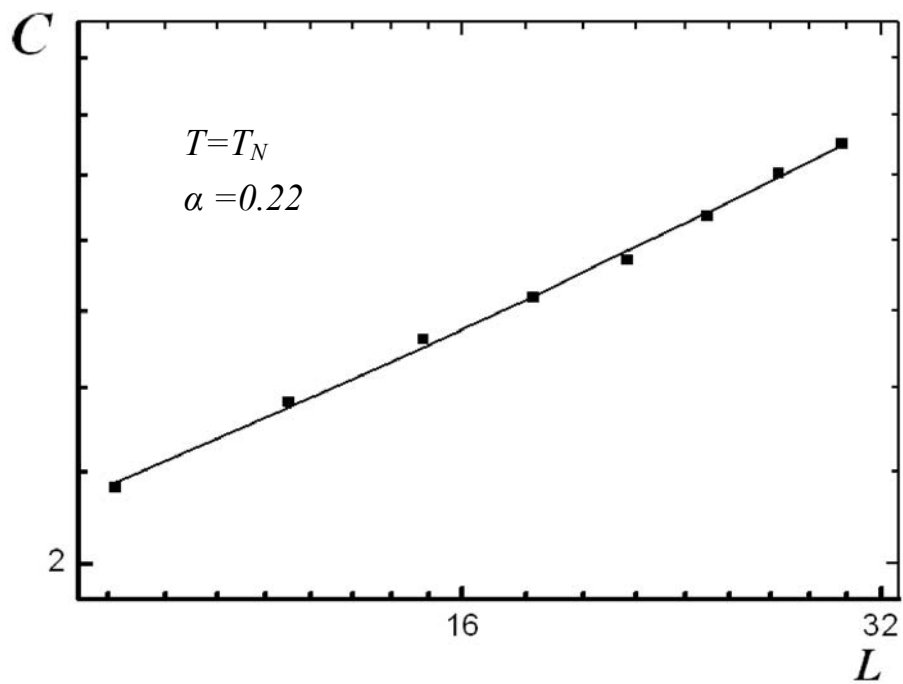


Рис.3.18. Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

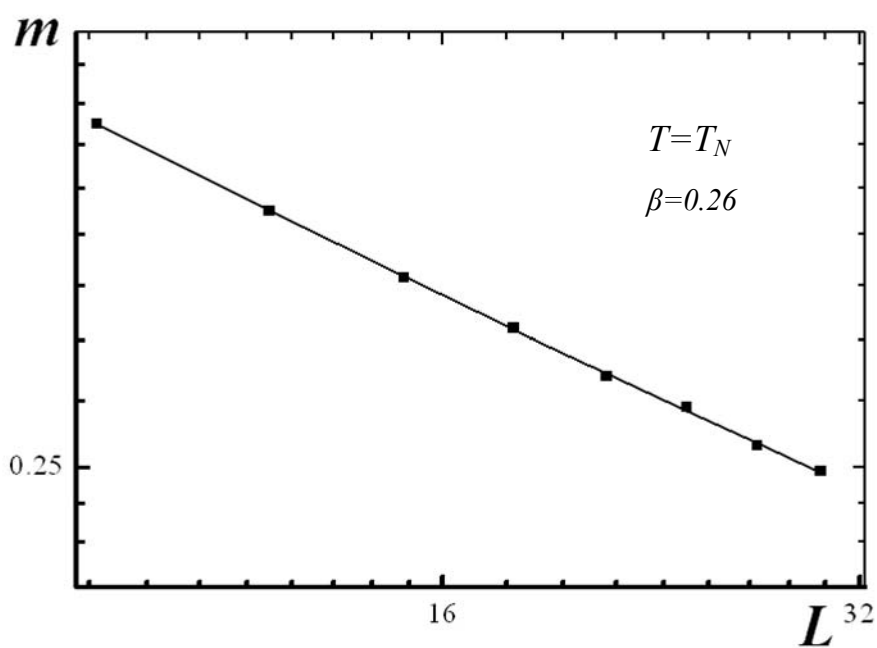


Рис.3.19.Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

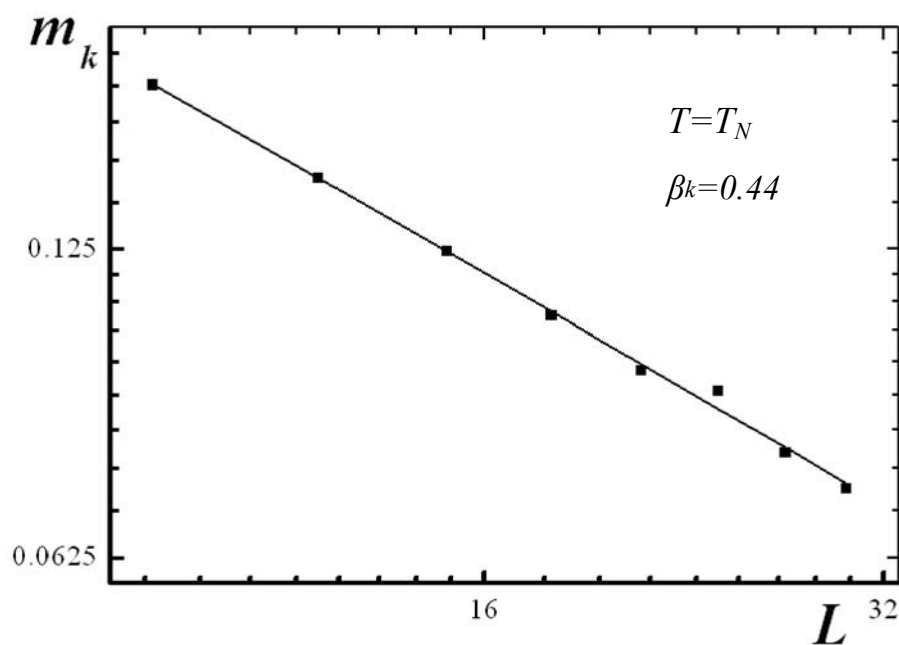


Рис.3.20.Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

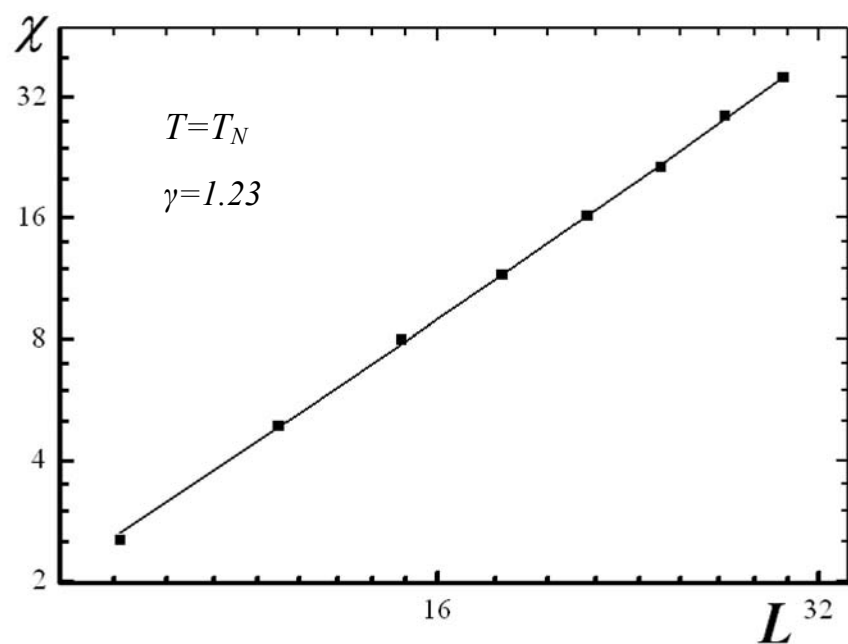


Рис.3.21. Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

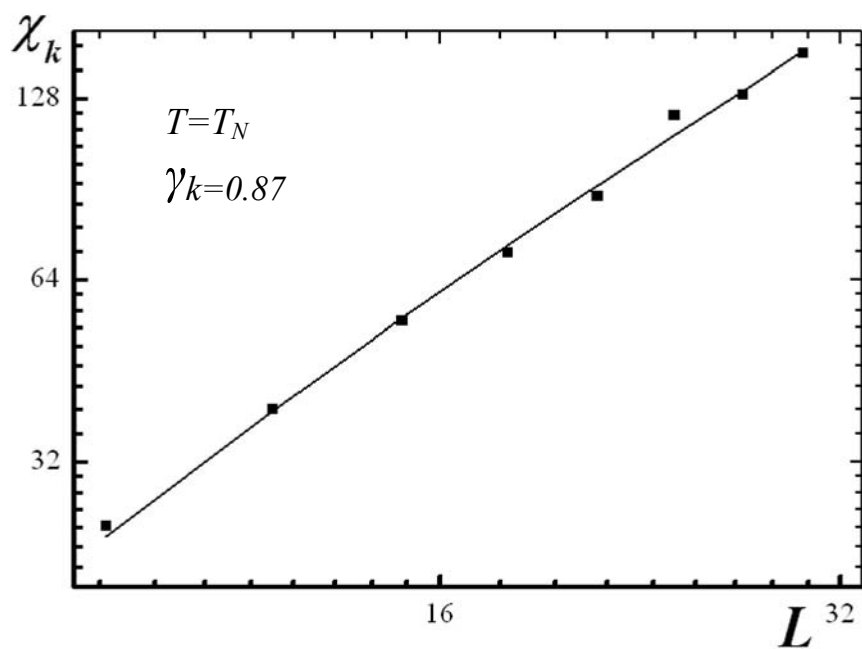


Рис.3.22. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $DI$ .

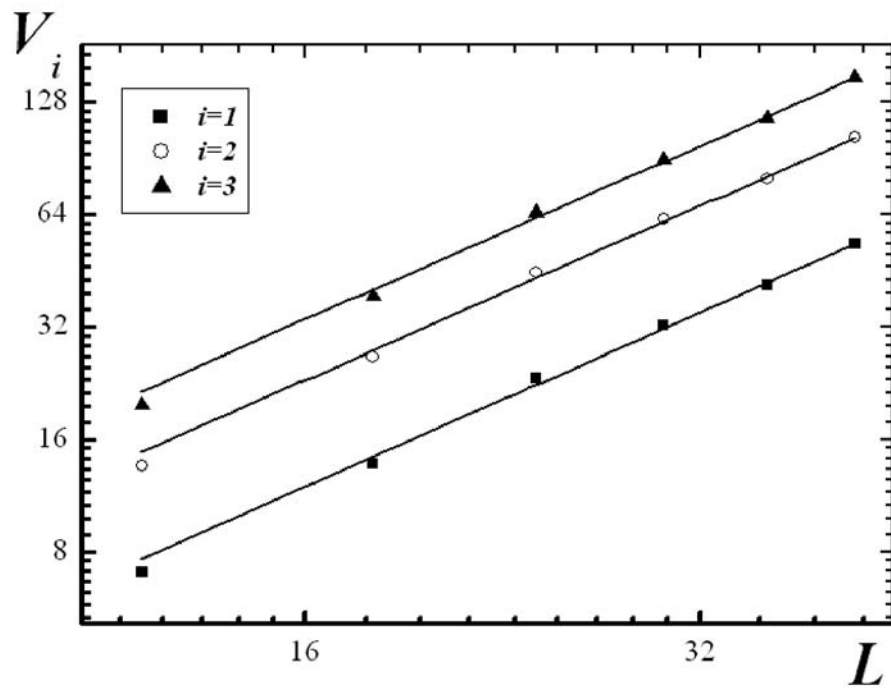


Рис.3.23. Зависимость параметров  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $D2$ .

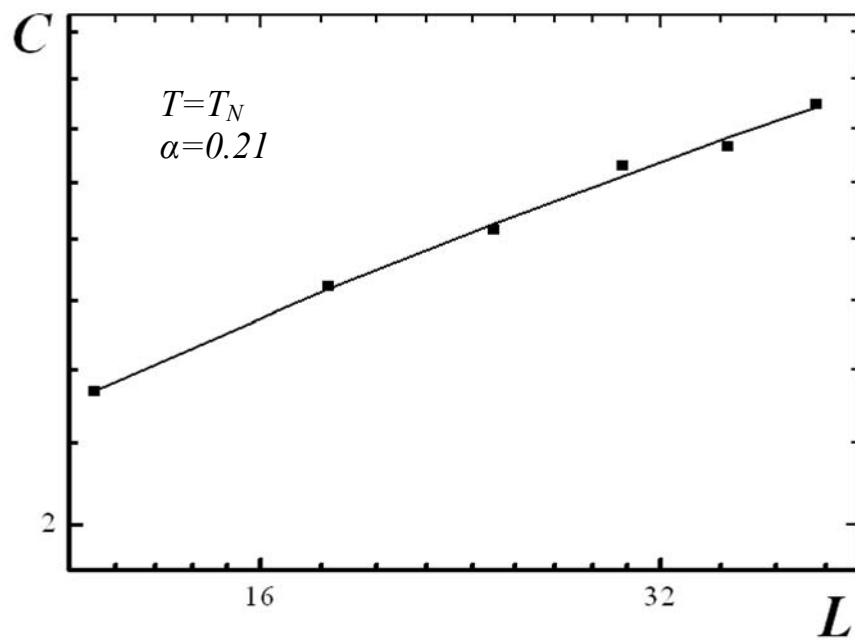


Рис.3.24. Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $D2$ .



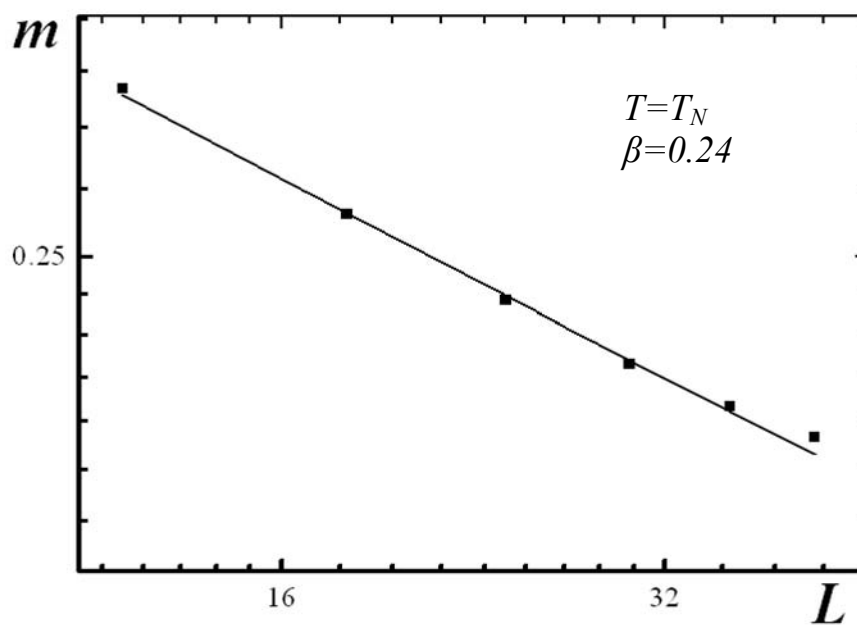


Рис.3.25. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $D2$ .

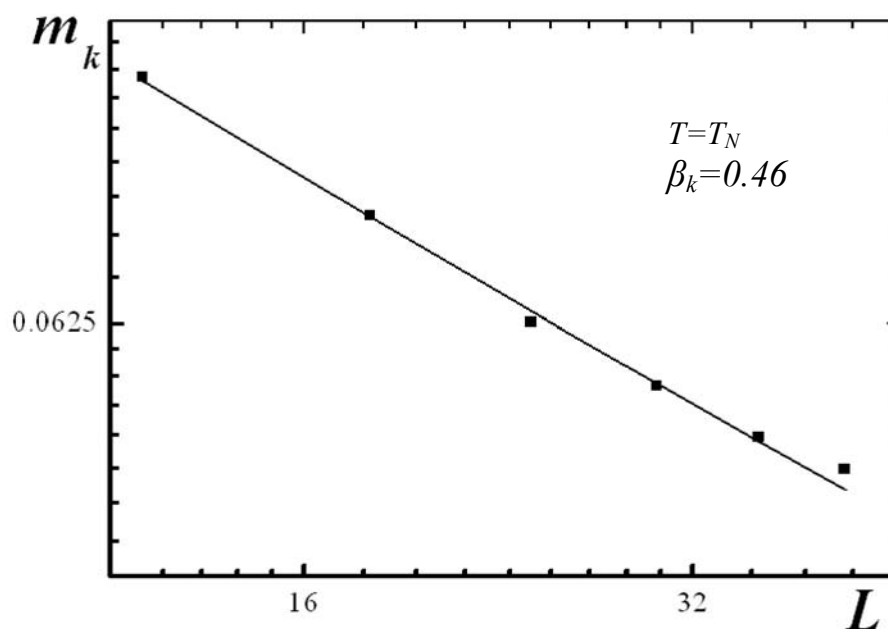


Рис.3.26. Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для модели  $D2$ .

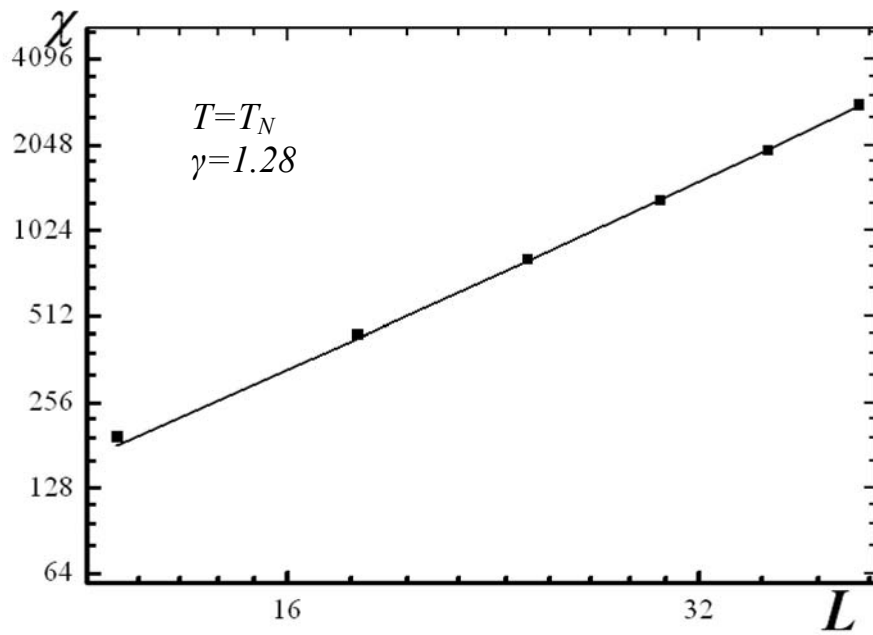


Рис.3.27. Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$  для модели  $D2$ .

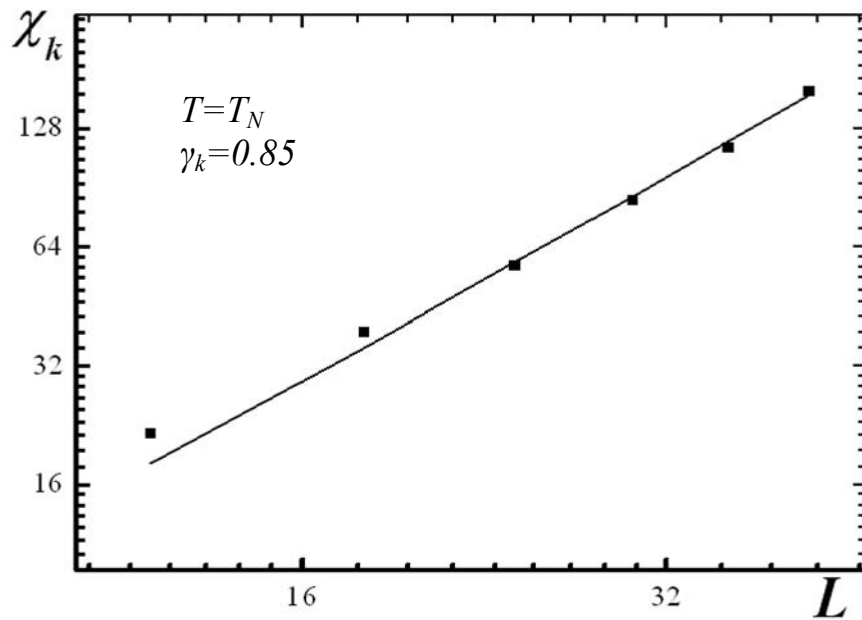


Рис.3.28. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$  для модели  $D2$ .

Особо следует отметить процедуру использованную нами для определения индекса Фишера  $\eta$  и  $\eta_k$ . С помощью отношений между восприимчивостью  $\chi$  и радиусом корреляции  $\xi$

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu} \quad (3.11)$$

а также соотношением  $\eta = 2 - \gamma/\nu$ , связывающего индексы  $\eta$  и  $\nu$ , получим

$$\ln(\chi/\xi^2) = c - \eta \ln \xi \quad (3.12)$$

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

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L \quad (3.13)$$

Результаты расчета всех индексов по вышеупомянутой схеме как для модели  $D_1$ , так и для модели  $D_2$  представлены в таблице 3.1. Отметим, что значения индексов для модели  $D_1$  и модели  $D_2$  приведенные в первой и второй строке соответственно получены на основе выражений (2.32, 2.33, 2.34, 2.39, 2.51, 2.52, 2.53), в которых не учитывались поправки к конечно-размерному скейлингу. Из этих данных следует, что все индексы имеют значения отличные от соответствующих величин характеризующих критическое поведение нефрустрированной модели Гейзенберга. Обращает на себя внимание и тот факт, что значения индекса теплоемкости стало положительным для обеих моделей, тогда как индексы Фишера  $\eta$  и  $\eta_k$  принимают отрицательные значения. Напомним, что для классической модели Гейзенберга, наоборот,  $\alpha < 0$ , а  $\eta > 0$ . Кроме того, бросается в глаза заметное (лежащее за пределами погрешности) отличие значений соответствующих индексов модели  $D_1$  и  $D_2$  друг от друга. Хотя ряд значений индексов, особенно для модели  $D_1$  достаточно хорошо согласуются с результатами лабораторных экспериментов [116] и данных метода Монте-Карло[11].

При этом, как для модели  $D_1$  так и для модели  $D_2$  хорошо выполняются скейлинговые соотношения.

Как известно, при расчете критических индексов с использованием скейлинговых соотношений желательно учитывать процедуру коррекции к скейлингу [138-141]. Для этого результаты наших численных экспериментов были обработаны нами с использованием выражений (3.2)-(3.7). индекс коррекции к скейлингу  $\omega$  брался нами из литературных данных [138], соответствующий для классической трехмерной модели Гейзенберга ( $\omega = 0.78$ ). Индекс  $\omega$  вычисленный для фрустрированной модели Гейзенберга найти в литературе не удалось. Полученные после соответствующей обработки значения статических магнитных и киральных критических индексов для модели  $D_1$  и  $D_2$  в пределах погрешности практически совпадают. При этом скейлинговые соотношения между критическими индексами выполняются с той же степенью точности, что в случае их расчета без учета коррекции к скейлингу. Это дает нам основание утверждать, что класс универсальности критического поведения моделей  $D_1$  и  $D_2$  совпадает. Следовательно, характер критического поведения трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке не зависит от типа межплоскостного обменного взаимодействия. Кроме того, численные значения критических индексов для данной модели убедительно свидетельствует о том, что эти модели образуют новый киральный класс универсальности критического поведения. Для сравнения в строке 5 и 6 таб.3.1 представлены экспериментальные и Монте-Карлло результаты для аналогичных систем. В последней строке таблицы приведены значения критических индексов полученных теоретическими методами.

Таблица 3.1. Значения критических параметров для трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом поправки к скейлингу.

№	Модель	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$	$\beta_k$	$\gamma_k$	$\nu_k$	$\eta$	$\eta_k$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$	$\alpha+2\beta_k+\gamma_k=2$
1	D <sub>1</sub> [137]	0.26(2)	0.26(2)	1.23(3)	0.59(2)	0.43(3)	0.87(3)	0.59(2)	-0.09(3)	0.50(5)	2.01	1.99
2	D <sub>2</sub> [137]	0.05(2)	0.30(1)	1.36(2)	0.64(1)	0.52(2)	0.93(3)	0.64(2)	-0.06(3)	0.63(5)	2.01	2.02
3	D <sub>1</sub> $\omega=0.78$	0.22(2)	0.26(2)	1.26(2)	0.57(2)	0.46(3)	0.87(3)	0.57(3)			2	1.97
4	D <sub>2</sub> $\omega=0.78$	0.21(2)	0.24(2)	1.28(2)	0.59(2)	0.44(3)	0.85(3)	0.59(3)			1.97	1.98
5	Эксп-т [116]	0.39(9)	0.25(1)	1.10(5)	-	0.44(2)	0.84(7)	-			1.99	2.11
6	Метод МК [11]	0.24(8)	0.30(2)	1.17(7)	0.59(2)	0.55(2)	0.72(2)	0.60(2)			2.01	2.06
7	Теория [139]	0.11	0.31	1.26	0.63	-	-	-			1.99	-



### **§ 3.3. Критическое поведение фрустрированной модели Гейзенберга с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.**

Характер и особенности критического поведения фрустрированных систем зависит от многих факторов. Одним из таких факторов является учет взаимодействия вторых ближайших соседей. В связи с этим нами исследованы фазовые переходы и критические явления в трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

Интерес к этой модели обусловлен тем что, многие физические свойства ФС сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Имеющиеся в литературе результаты не позволяют составить полную и непротиворечивую картину фазовых переходов в этой модели [142, 143]. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

Гамильтониан для этой модели выглядит так:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - J_1 \sum_{\langle il \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_l) \quad (3.14)$$

где  $\vec{S}_i$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J < 0$  и  $J_1 < 0$  – константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (3.1) характеризует взаимодействие ближайших соседей, а второй характеризует взаимодействие следующих ближайших соседей. Здесь мы рассмотрим результаты исследований для фрустрированной модели

Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Для этого нами рассмотрено критическое поведение данной модели при разных значениях величины  $R=|J_1/J|$ .  $R$  – величина взаимодействия вторых соседей. Нами рассмотрены случаи, когда  $R = 0.0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.115$ .

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости, намагниченности и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения (2.56), (2.57), (2.58), (2.61).

Температуры фазовых переходов, для всех  $R$ , были найдены используя высокоточный метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка (2.35). Согласно теории конечно-размерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых  $U_L$  в их температурной зависимости является критической точкой.

Расчеты проводили для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-42$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной  $\tau_0=4.0 \times 10^5$  МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводили вдоль марковской цепи длиной  $\tau = 250\tau_0$ . Для повышения точности проводили усреднение и по данным, полученным из двадцати различных начальных конфигураций. Полученные таким образом значения термодинамических параметров усреднялись по всем 20 конфигурациям. Затем эти данные использовались для построения графиков.

На рисунках 3.29, 3.30 представлены характерные зависимости кумулянтов Биндера от температуры для  $R=0.025$  и  $R= 0.1$ . Из графиков видно, что кумулянты для разных  $L$  пересекаются в одной точке по определению, которая является критической точкой  $T_N$ . Эти значения  $T_N$  и были нами использовано в дальнейшем в качестве критической

температуры. Аналогичным образом были определены значения критических температур и при других значениях  $R = 0.0, 0.0,; 0.075, 0.115$ . Все эти данные представлены в таблице 3.2.

Использование аналогичной процедуры для определения киральной критической температуры  $T_k$  дает существенно менее точные значения. Поэтому для определения  $T_k$  нами использовался метод пересечения кумулянтов (cumulant crossing), который считается более точным и надежным [9,126]. Подробное описание этого метода приведена в параграфе 2.6. Характерные зависимости температуры  $T_k$  от величины  $\ln^{-1}(L'/L)$  для  $L=12, 18, 24$  при  $R=0.05$  и  $R=0.1$  представлена на рис 3.31 и 3.32. Из рисунков видно, что при  $\ln^{-1}(L'/L) \rightarrow 0$  все зависимости для разных  $L$  сходятся к одной точке. Значения  $T_k$  в этой точке соответствует киральной критической температуре  $T_k=0.825(2)$  для  $R=0.05$  и  $T_k=0.657(1)$  для  $R=0.1$ . Эти данные представлены в таблице 3.2. Обращает внимание на себя тот факт, что значения магнитной  $T_N$  и киральной критической температуры  $T_k$  для соответствующих значений  $R$  в пределах погрешности совпадают.

Зависимости для магнитного и кирального параметра порядка от температуры приведены на рисунках 3.33, 3.34. На кривых мы наблюдаем резкий спад в области критической температуры и этот спад приходится на одну и ту же температуру для соответствующих  $R$ . Отметим, что как для магнитного, так и для кирального параметра порядка практически отсутствуют высокотемпературные «хвосты».

Температурные зависимости для теплоемкости и восприимчивости приведены на рисунках 3.35 и 3.36. Отметим, что рост значения  $R$  сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов как теплоемкости, так и восприимчивости. Очевидно, что это связано с



усилением конкурирующих взаимодействий вторых ближайших соседей, вследствие чего система становится более восприимчивой.

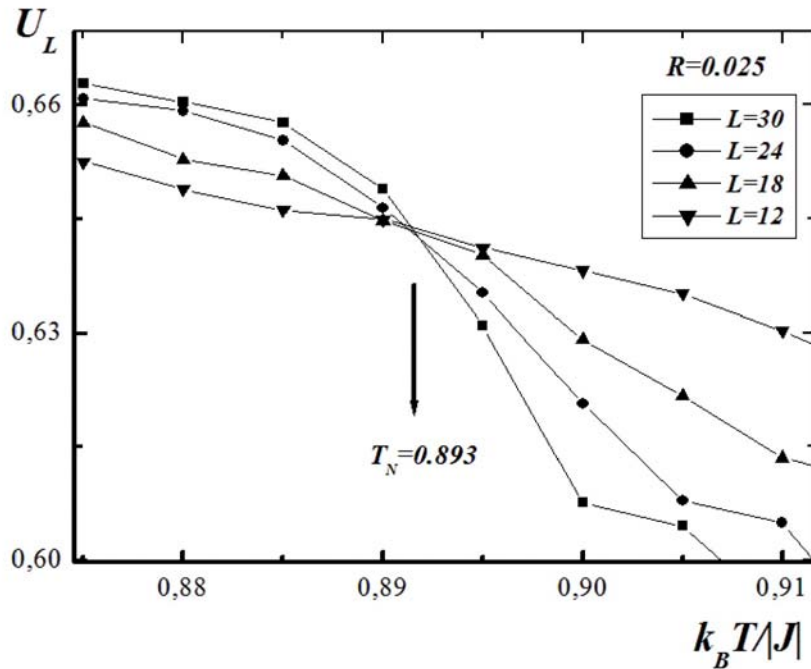


Рис.3.29. Зависимость кумулянта биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $k=0.025$ .

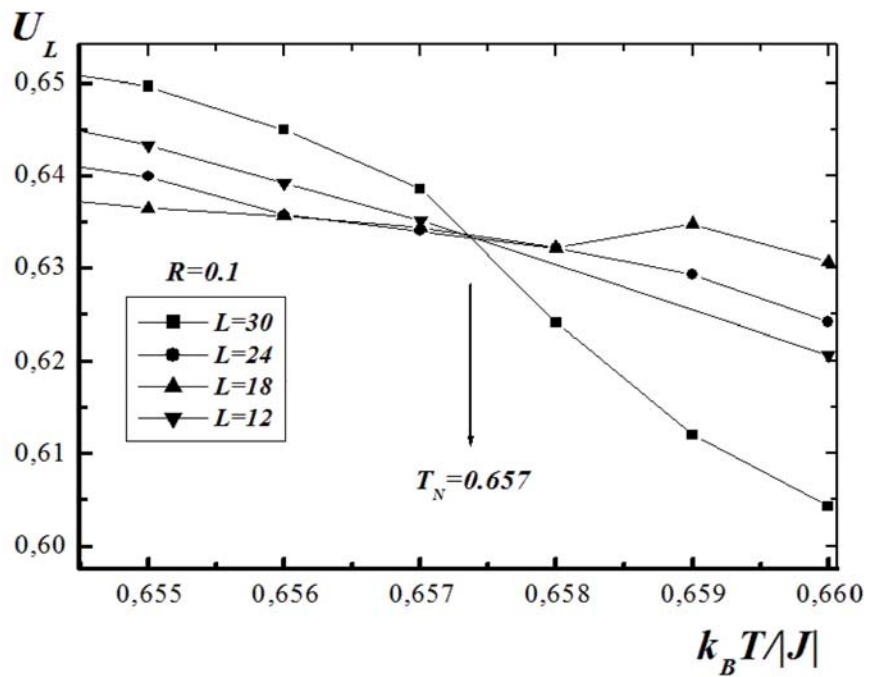


Рис.3.30. Зависимость кумулянта биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $R=0.1$ .

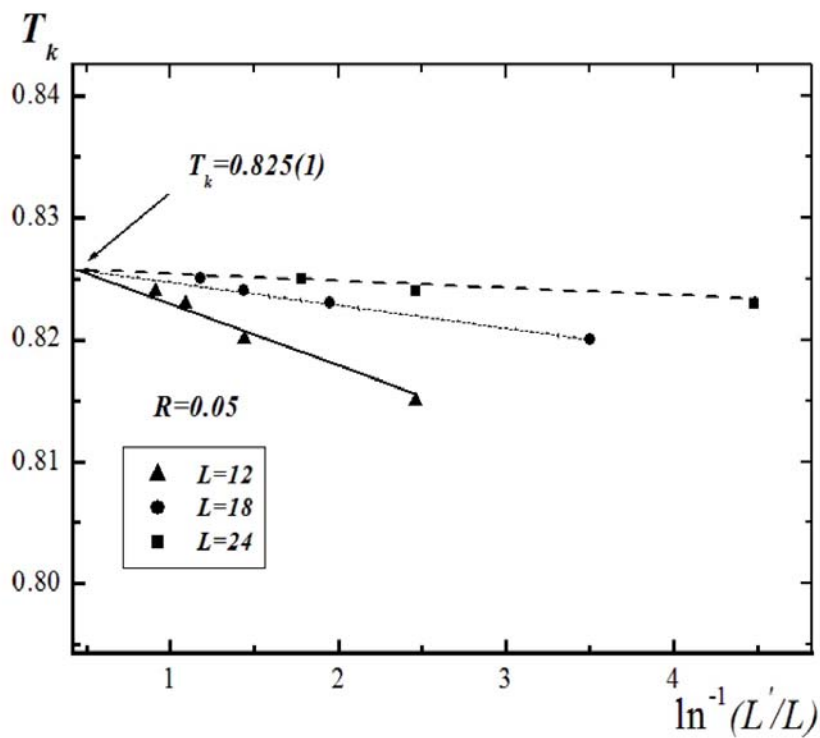


Рис3.31. Зависимость температуры  $T_k$  от  $\ln^{-1}(L'/L)$  при  $L=12;18;24$  для  $R= 0.05$ .

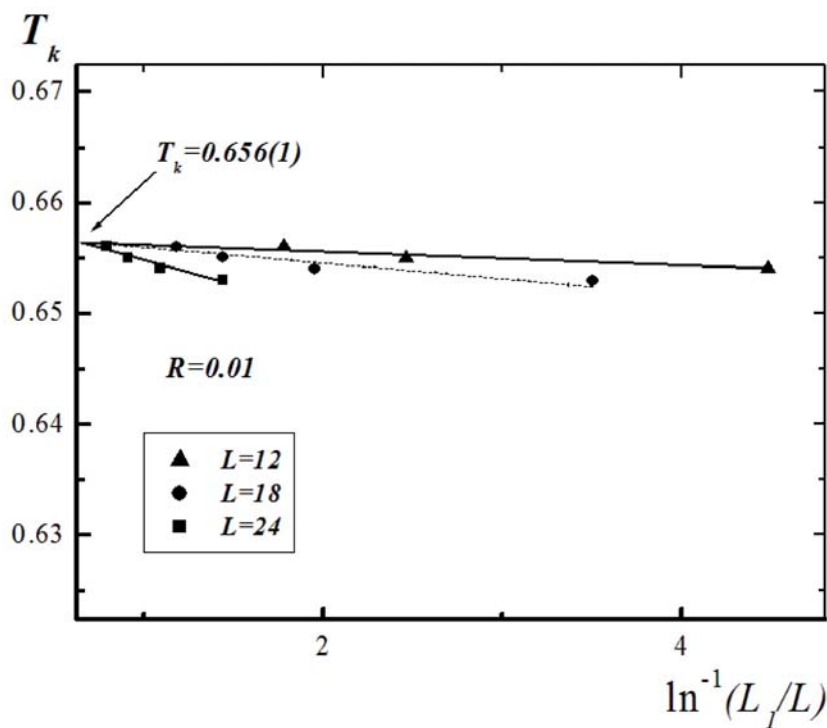


Рис3.32. Зависимость температуры  $T_k$  от  $\ln^{-1}(L'/L)$  при  $L=12;18;24$  для  $R= 0.01$ .

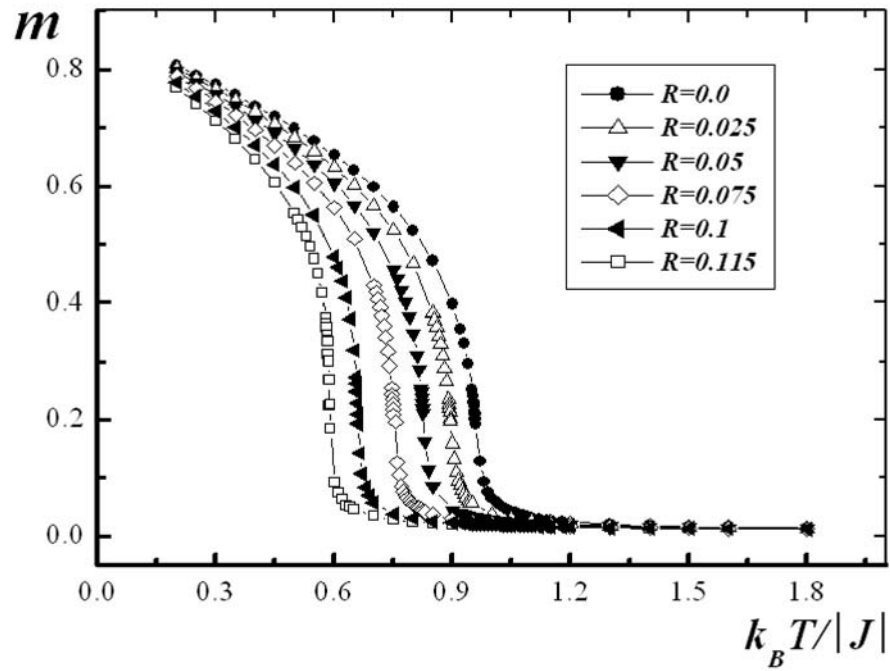


Рис.3.33. Зависимость магнитного параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$  для  $L = 30$ .

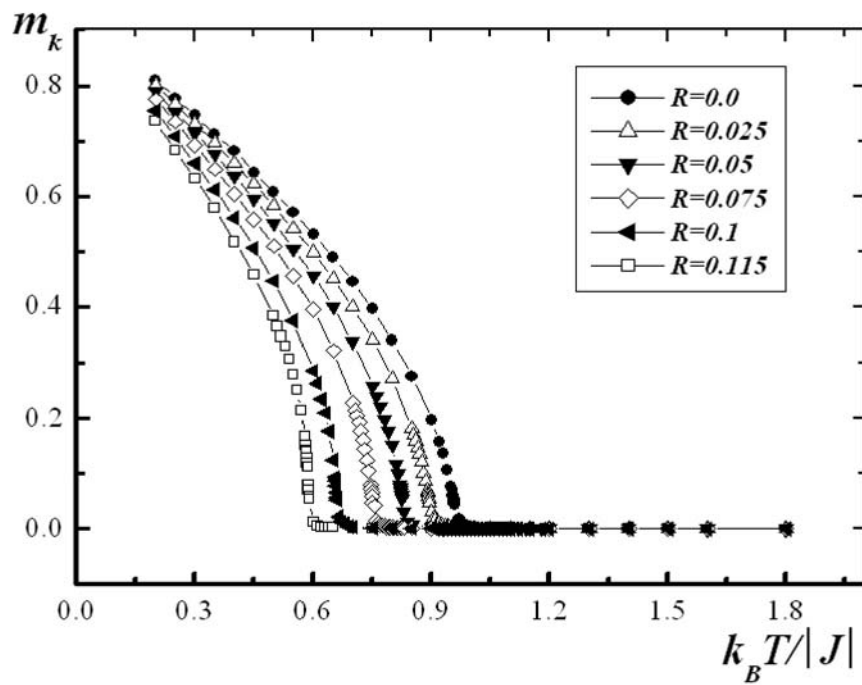


Рис.3.34. Зависимость кирального параметра порядка от температуры  $k_B T / |J|$   $L = 30$ .

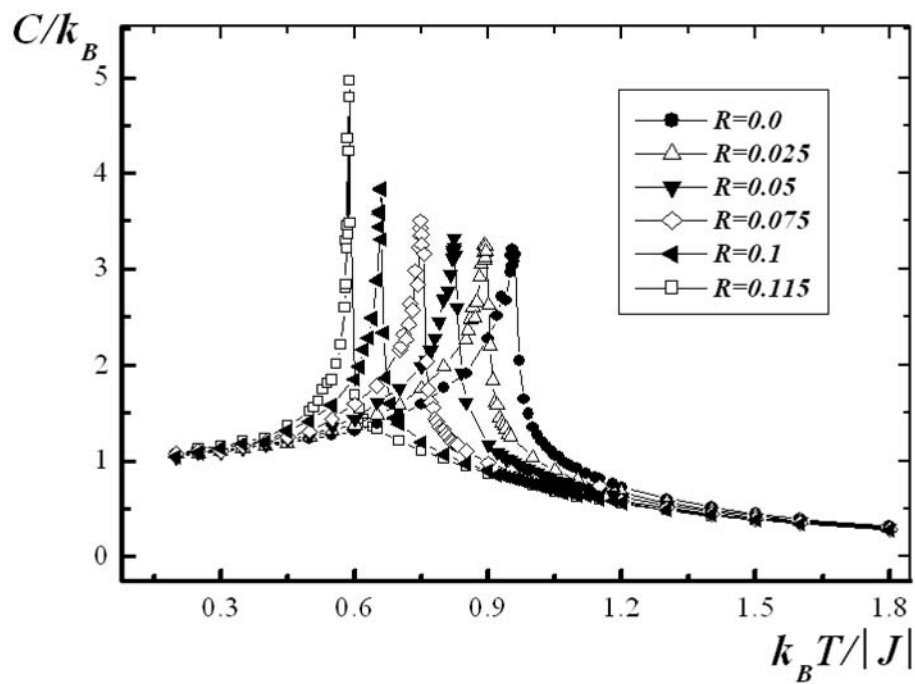


Рис.3.35. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  для  $L=30$ .

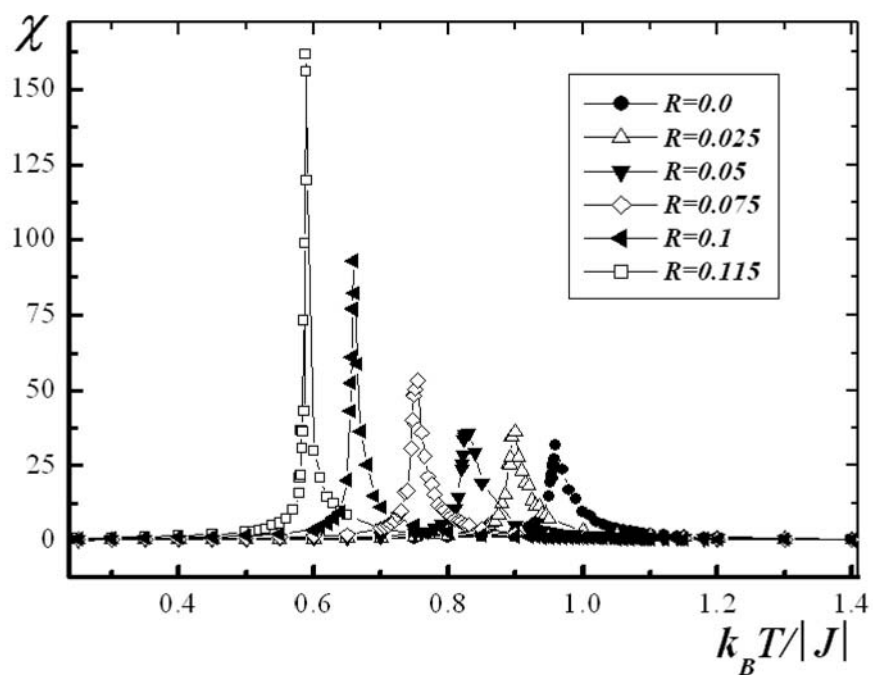


Рис.3.36. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/|J|$  для  $L=30$ .

Для расчета эффективных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  и индекса радиуса корреляции  $\nu$  и  $\nu_k$  воспользуемся выражениями (2.32), (2.51), (2.33), (2.52) и (2.38).

Критический индекс радиуса корреляции был определен тремя способами. На рис.3.37 и 3.38 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров  $V_n$  для  $n=1; 2; 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для  $R=0.025$  и  $R=0.1$ . Как видно из рисунков, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Угол наклона прямой определяет значения  $1/\nu$ . Как видно из рисунка эти прямые расположены параллельно друг другу, что говорит о том что все три значения индекса  $\nu$  хорошо совпадают между собой.

Затем, по аналогичной схеме были построены характерные зависимости магнитного параметра порядка  $m$ , магнитной восприимчивости  $\chi$ , теплоемкости  $C_{max}$ , кирального параметра порядка  $m_k$  и киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров решетки  $L$  для всех значений  $R$ .

На рис. 3.39-3.48 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости теплоемкости, магнитного и кирального параметра порядка, магнитной и киральной восприимчивости от линейных размеров решетки  $L$  при  $R=0.025$  и  $0.1$ . Как видно из рисунка, все данные «ложатся» на прямую, угол наклона которой определяет значение  $\alpha/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ . По этой схеме определены значения  $\alpha/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $1/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ ,  $1/\nu_k$  и для всех значений  $R$ . Далее с помощью полученных в рамках данного исследования значений  $\nu$  и  $\nu_k$  рассчитывались  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\gamma$ , и  $\gamma_k$ . С помощью соотношений теории конечно-размерного скейлинга были рассчитаны эффективные киральные и

магнитные критические индексы для этой модели и при значениях  $R=0.0\div 0.115$ .

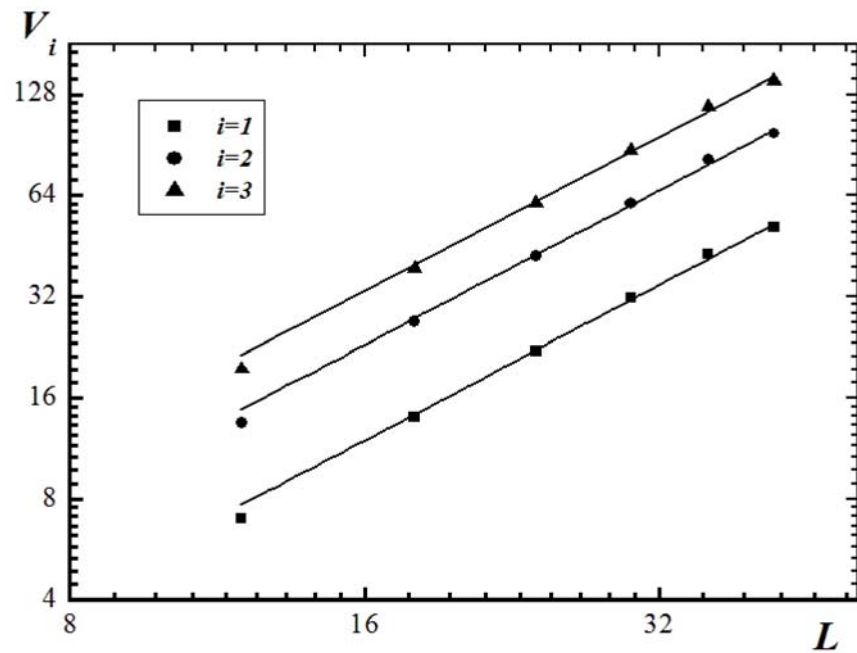


Рис.3.37. Зависимость параметров  $V_i$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.025$ .

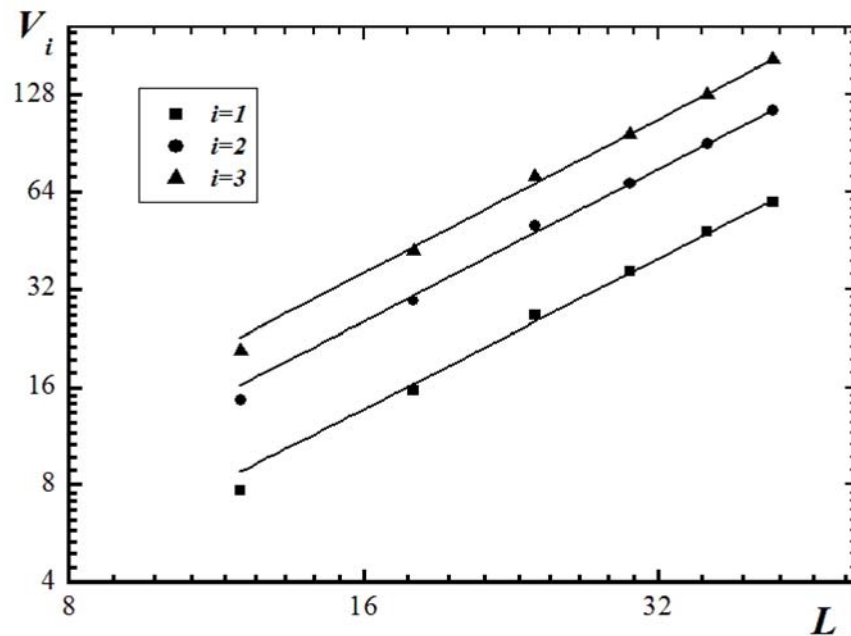


Рис.3.38. Зависимость параметров  $V_i$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.1$ .

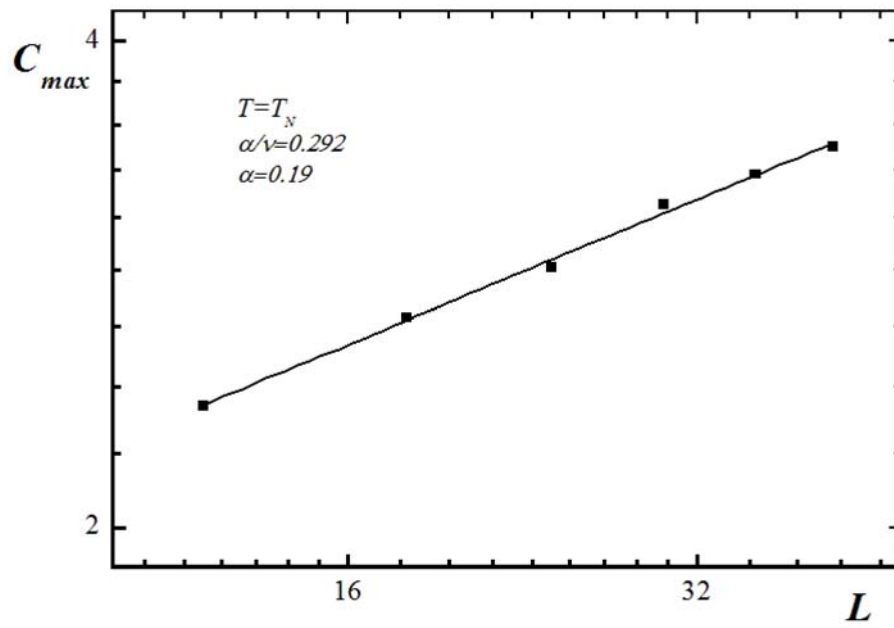


Рис.3.39.Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.025$ .

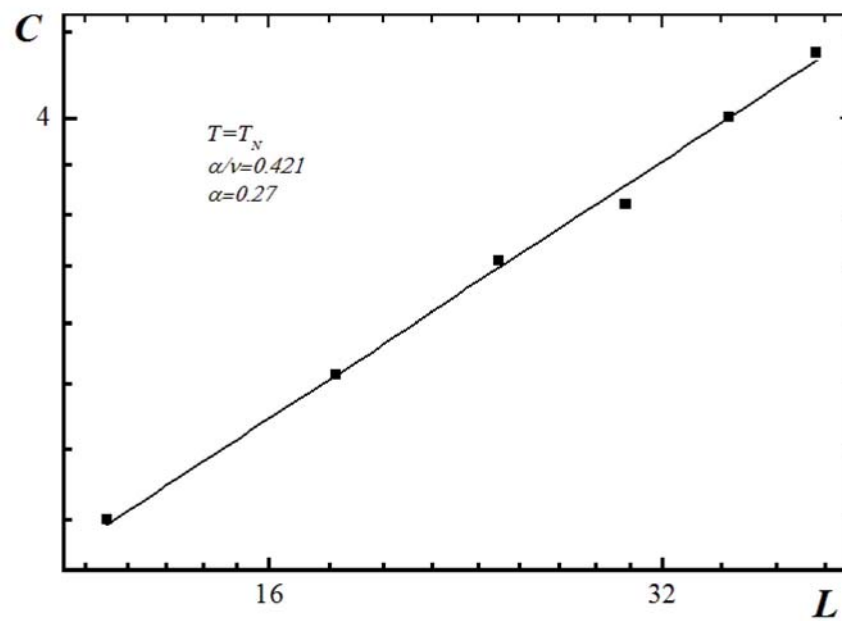


Рис.3.40.Зависимость теплоемкости  $C$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.1$ .

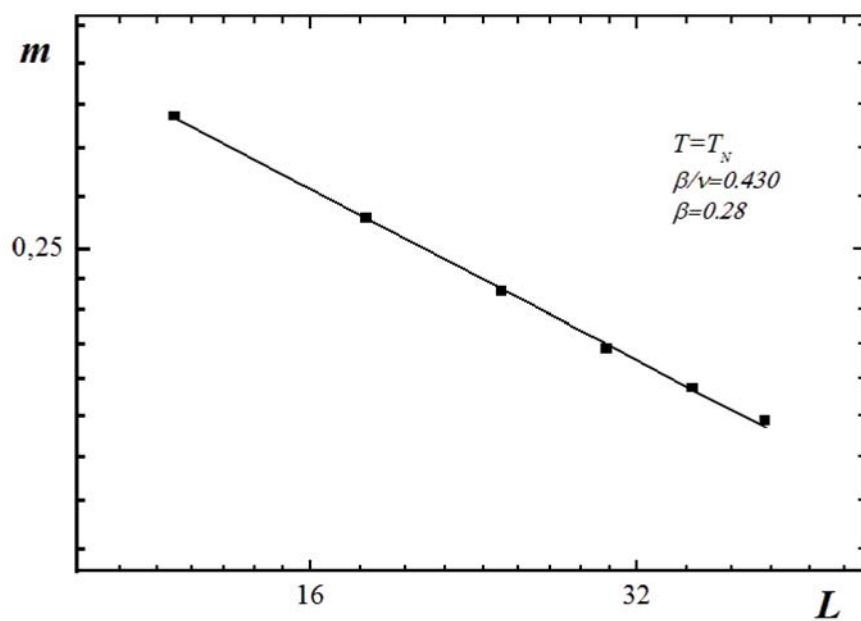


Рис.3.41. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$   $R=0.025$ .

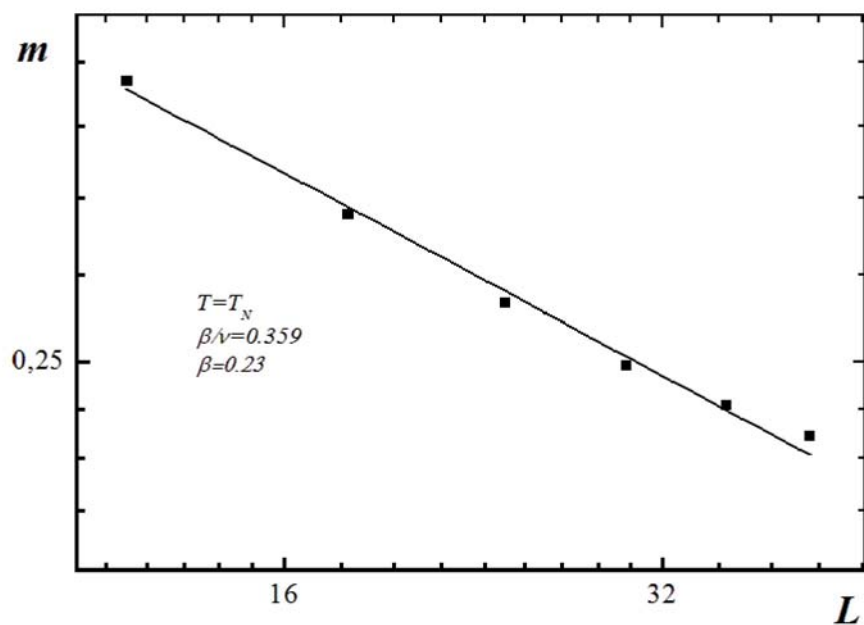


Рис.3.42. Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.1$ .



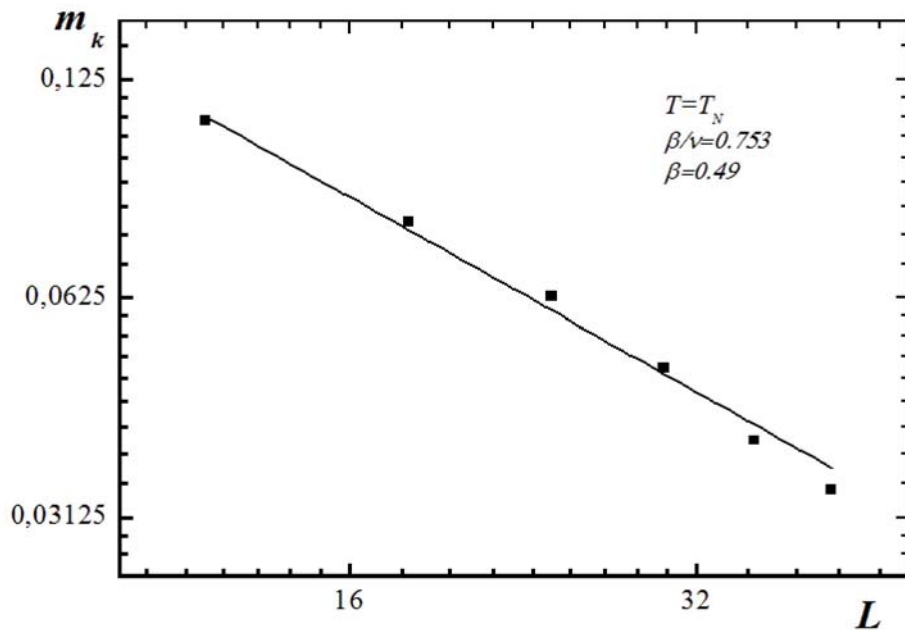


Рис.3.43. Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.025$ .

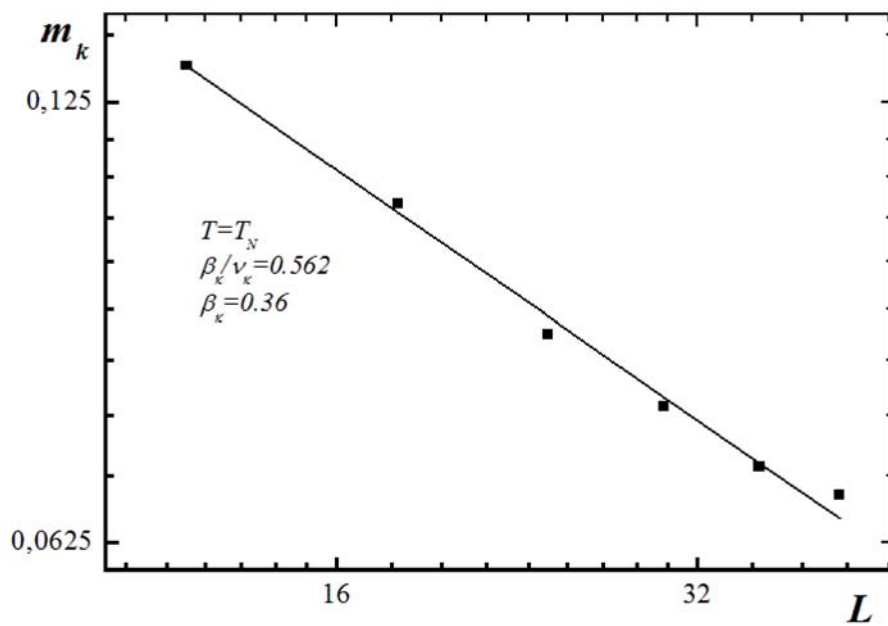


Рис.3.44. Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.1$ .

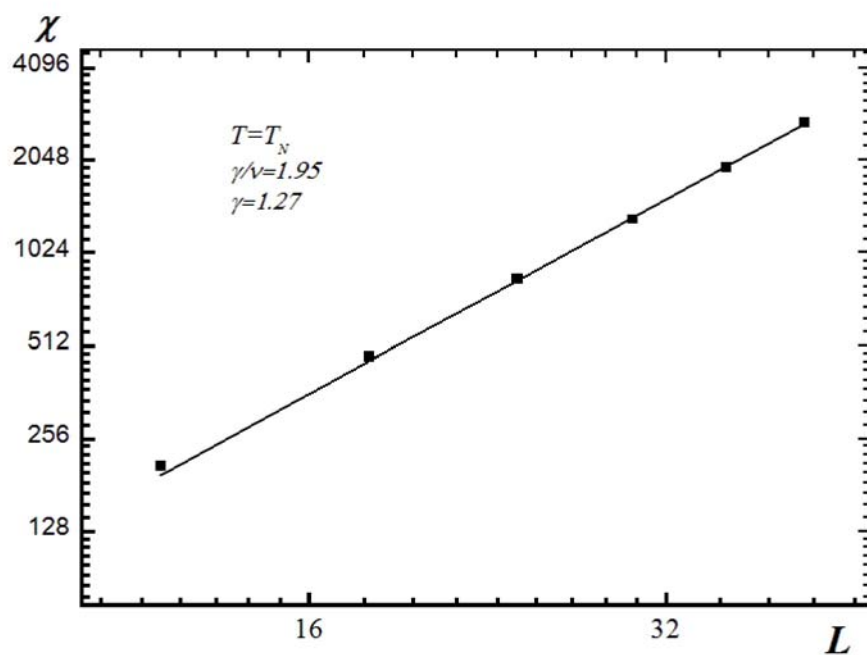


Рис.3.45.Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.025$ .

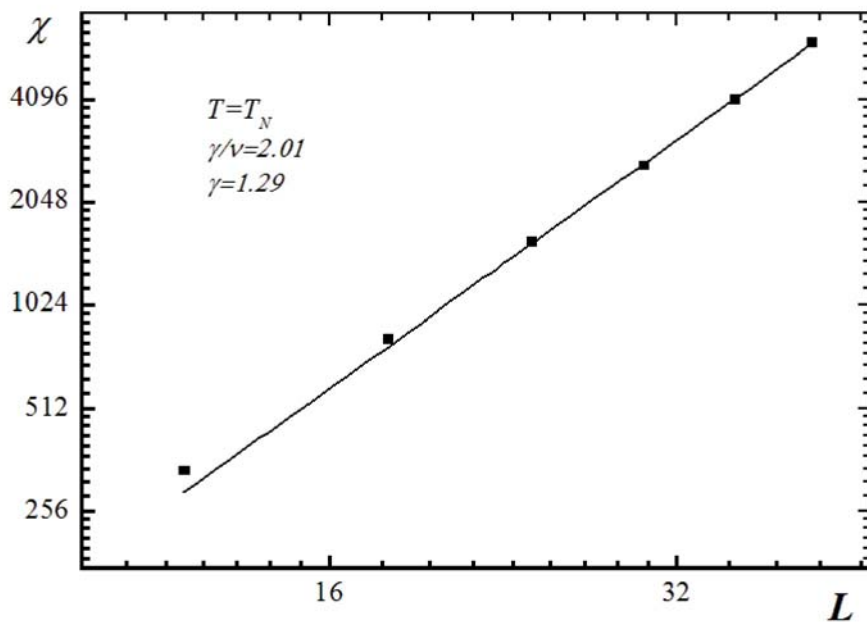


Рис.3.46.Зависимость магнитной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для 0.1.

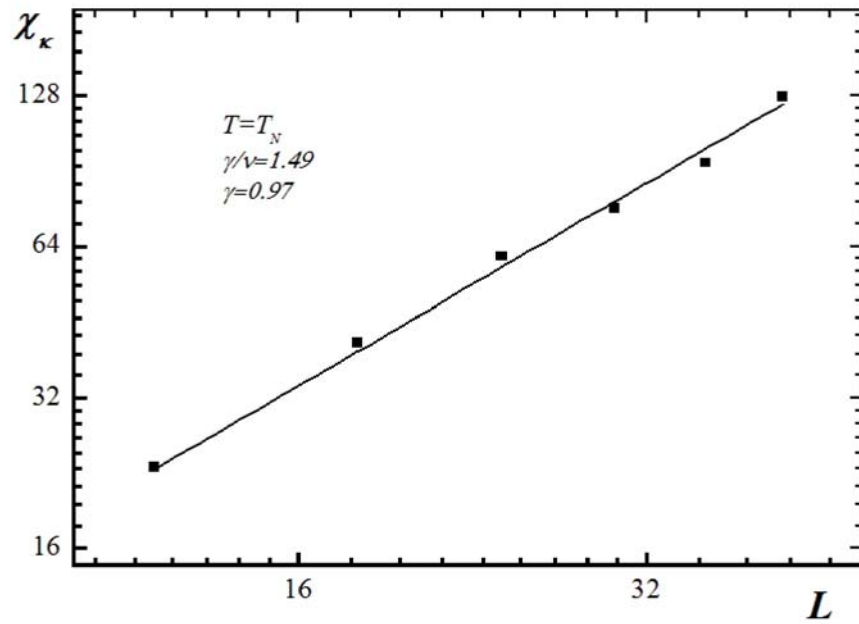


Рис.3.47. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для  $R=0.025$ .

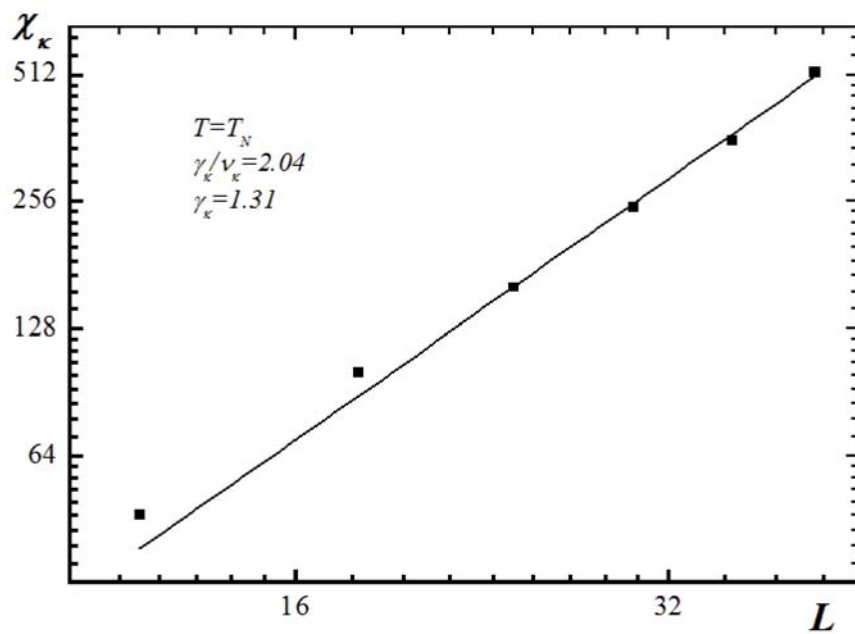


Рис.3.48. Зависимость киральной восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T=T_N$  для 0.1.

Таблица.3.2. Значения эффективных магнитных критических индексов для трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей.

$R$	$T_N$	$\nu$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\eta$	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
0	0.957(2)	0.65(1)	0.18(2)	0.28(2)	1.27(2)	-0.06(6)	2.01
0.025	0.893	0.65	0.20	0.28	1.27	-0.11	2.03
0.05	0.824	0.65	0.22	0.28	1.26	-0.15	2.04
0.075	0.747	0.65	0.22	0.25	1.28	-0.24	2
0.1	0.657	0.64	0.27	0.23	1.30	-0.30	2.03
0.115	0.588	0.50	0.46	0.20	1.21	-0.15	2.07

Таблица.3.3. Значения эффективных киральных критических индексов для трехмерной Фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей.

$R$	$T_k$	$\nu_k$	$\alpha$	$\beta_k$	$\gamma_k$	$\eta_k$	$\alpha+2\beta_k+\gamma_k=2$
0	0.957(2)	0.65(2)	0.18	0.50(3)	0.83(4)	0.70(12)	2.01
0.025	0.893	0.65	0.20	0.49	0.89	0.50	2.06
0.05	0.824	0.65	0.22	0.46	0.92	0.44	2.06
0.075	0.747	0.65	0.22	0.43	0.98	0.33	2.06
0.1	0.657	0.64	0.27	0.36	1.07	0.11	2.06
0.115	0.588	0.50	0.46	0.35	1.26	0.03	2.4

Из данных представленных в таблице 3.2 и 3.3 для данной модели при всех значениях  $R$  индекс теплоемкости  $\alpha > 0$ , в то время как индекс Фишера  $\eta < 0$ , а киральный индекс Фишера  $\eta_k > 0$ . Можно отметить, что в зависимости от  $R$  значения индексов  $\nu$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\eta$  в пределах  $R = 0.0 \div 0.075$  практически не меняются и имеют значения отличные от максимальных, которые характеризуют для классической модели Гейзенберга. При этом скейлинговые соотношения между критическими индексами выполняются с достаточно хорошей степенью точности. Но при значениях  $R = 0.1$  и  $R=0.115$  некоторые индексы претерпевают существенные изменения. Например, при  $R = 0.1$  это индекс  $\alpha$ , а при  $R = 0.115$  индексы  $\nu$ ,  $\alpha$  и  $\eta$ . Скейлинговые соотношения при этом так же выполняются. Аналогичная картина наблюдается и для киральных критических индексов в пределах изменения  $R = 0.0 \div 0.075$ . При  $R = 0.1$  резкое изменение претерпевает индекс Фишера  $\eta_k$ , а при  $R = 0.115$  существенно меняются значения индексов  $\nu_k$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma_k$  и  $\eta_k$ . Отметим, что киральные критические индексы при  $R = 0.115$  изменялись настолько и таким образом, что соотношения Рашбрука для них не выполняется.

Из данных представленных в таблице 3.1 и 3.3 следует, что трехмерная антиферромагнитная фрустрированная модель Гейзенберга с взаимодействием вторых ближайших соседей в пределах изменения  $R = 0.0 \div 0.075$  не меняет характер своего критического поведения. При значении  $R \geq 0.1$  наблюдается довольно резкое изменение значений и магнитных и киральных критических индексов. Кроме того, при  $R=0.115$  соотношения Рашбрука для киральных критических индексов не выполняется совсем. Все эти особенности при  $R \geq 0.075$ , по видимому, связаны с близостью к мультикритической точке, где сосуществуют антиферромагнитная фаза, коллинеарная фаза и парамагнитная фаза.

**§ 3.4. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели  
Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями  
вторых ближайших соседей.**

Исследование магнитных и общетермодинамических свойств такой модели методом МК с учетом и без учета взаимодействия вторых ближайших соседей выполнено в работах [142,143]. В этих работах рассчитаны некоторые статические магнитные критические индексы, а так же приведена фазовая диаграмма зависимости температуры перехода от отношения обменных параметров  $R=|J_1/J_2|$ ,  $J$  и  $J_1$  – константы обменного взаимодействия ближайших и вторых ближайших соседей. Здесь показано, что в окрестности точки  $R=0.115$  имеют место два фазовых перехода: низкотемпературный переход из гелимагнитной в коллинеарную фазу и высокотемпературный переход из коллинеарной фазы в парамагнитную. На фазовой диаграмме показано, что переходы из гелимагнитной в коллинеарную и в парамагнитную фазы являются переходами второго рода, а переход из коллинеарной фазы в парамагнитную переходом первого рода.

Для определения критической температуры  $T_N$ , мы использовали метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Методика определения  $T_N$  была описана нами выше.

На рис.3.50. приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей полученная нами. На этой диаграмме мы видим область сосуществования трех фаз: I – гелимагнитная ( $120^\circ$  структура), II – коллинеарная и III – парамагнитная. Переход из гелимагнитного упорядочения в фазе I к коллинеарному в данной модели обусловлено изменением структуры основного состояния. По мере приближения к точке, где сосуществуют три

фазы, температура фазового перехода смещается в сторону более низких температур.

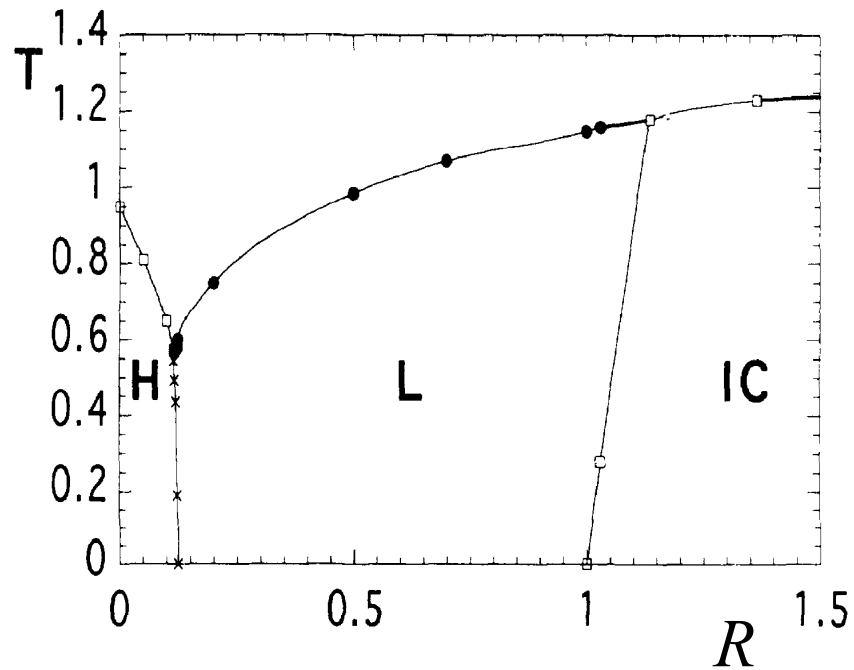


Рис. 3.49. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. D. Loison, and H.T. Diep, Phys. Rev. B **50**, 16453 (1994).

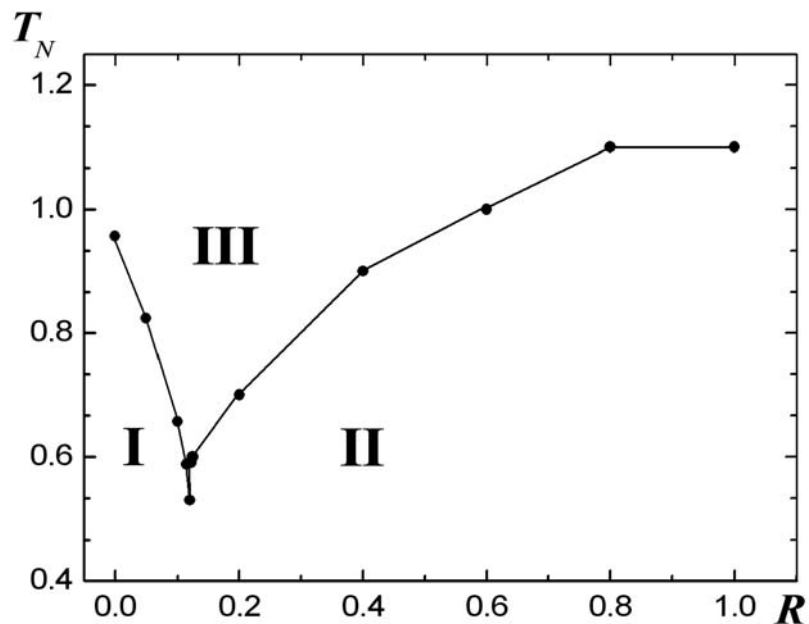


Рис.3.50. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный метод МК [144,145]. Этот метод является наиболее эффективным для определения рода ФП. Гистограммный метод использует случайное блуждание в энергетическом пространстве и позволяет получить точные оценки для плотности состояний энергии  $g(U)$ . Вероятность перехода из одного состояния в другое определяется следующей формулой:

$$p(U \rightarrow U') = \min[g(U)/g(U'), 1] \quad (3.15)$$

где  $U$  и  $U'$  энергии до и после переворота спина.

Для эффективного использования этого метода, мы разделили весь диапазон энергии  $(U_{min}, U_{max})$  на  $r$  подинтервалов, где  $U_{min}^i$  это минимальная энергия подинтервала  $i=1,2,\dots,r$ ,  $U_{max}^i=U_{min}^{i+1}+2\Delta U$  это максимальная энергия подинтервала  $i$ .  $\Delta U$  мы брали достаточно большим, что обеспечило сглаживание границ между двумя подинтервалами. Далее нами были вычислены плотности состояний для каждого подинтервала  $(U_{min}^i, U_{max}^i)$ . Плотность состояний всей области был получен соединяя плотности состояний каждого подинтервала  $(U_{min}^i+\Delta U, U_{max}^i-\Delta U)$ .

В нашей работе проведено более подробное исследование интервала  $0.0 < R < 1.0$  и особенно в окрестности точки  $R=0.115$ . Нами изучаются три перехода, которые имеют место в окрестности точки  $R=0.115$ : из фазы I в фазу II, из фазы I в фазу III и из фазы II в фазу III. Наши данные, в отличие от данных, полученных в работе [142] показывают наличие фазового перехода первого рода, близкое ко второму, во всем интервале  $0.0 < R < 1.0$ . Это продемонстрировано на Рис. 3.30-3.32. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергетические для значений  $R=0.075$ ,  $R=0.126$  и  $R=0.4$ . Графики построены вблизи критической температуры для различных значений  $L$ . Из рисунка 3.31 видно что, в зависимости вероятности  $P(U)$  от энергии  $U$  для системы  $L=90$  наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые отсутствуют для системы  $L=30$  и  $L=60$ .



Это говорит о целесообразности изучения систем, линейные размеры которых не меньше  $L=90$ .

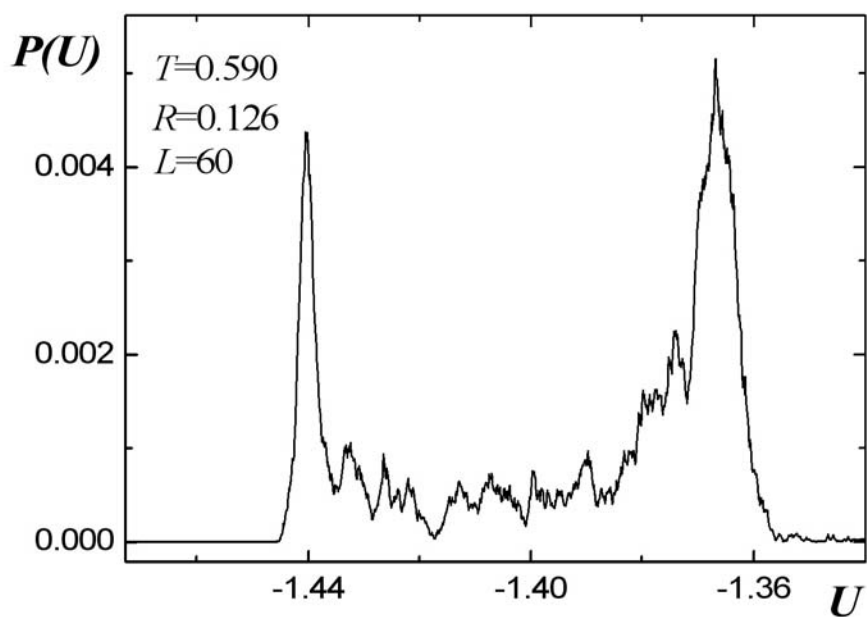


Рис.3.51. . Гистограмма распределения энергии для случая  $R=0.126$ .

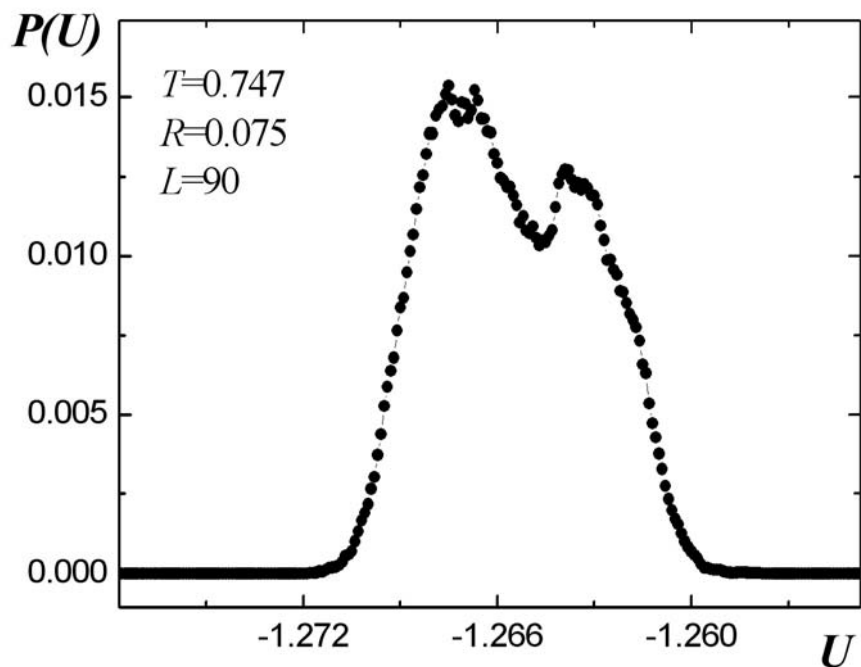


Рис.3.52. . Гистограмма распределения энергии для случая  $R=0.075$ .

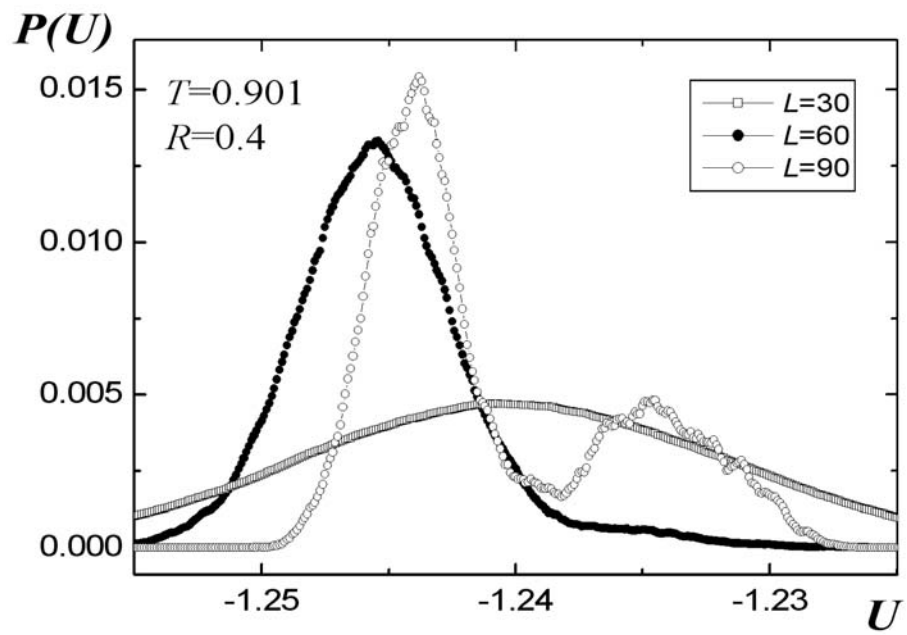


Рис.3.53. Гистограмма распределения энергии для случая  $R=0.4$ .

## ***ЗАКЛЮЧЕНИЕ.***

В настоящей работе проведено исследование термодинамического и критического поведения моделей фрустрированных магнитных систем методами численного эксперимента. Высокоэффективный репличный алгоритм метода МК также был применен для исследования моделей с фрустрациями. С использованием этого алгоритма исследованы статические критические свойства трехмерной модели Гейзенберга с фрустрациями на слоистой треугольной решетке с переменным межплоскостным обменным взаимодействием, модель Гейзенберга с разными знаками взаимодействия между плоскостями с изменением типа взаимодействия и с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Вычислены температурные зависимости основных термодинамических величин для этих моделей. На основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны все основные статические критические индексы этих моделей. Установлен характер критического поведения моделей фрустрированных систем и показано, что они образуют новый класс универсальности, отличный от соответствующих нефрустрированных моделей такого типа.

В связи с проблемами теории фазовых переходов и критических явлений определение характера критического поведения, и классов универсальности моделей с фрустрациями, исследование этих систем представляет огромный интерес.

Так исследования критических свойств фрустрированных моделей, проведенные высокоэффективным репличным алгоритмом и установленные при этом закономерности, а также подходы и методы, использованные при их исследовании и анализе данных, представляют также значительный методологический интерес.

Сложность рассматриваемых моделей не дает возможности провести строгие какие-либо аналитические расчеты и делает целесообразным применение методов вычислительной физики. Следует отметить, что и методы вычислительной физики при исследовании фрустрированных систем сталкиваются с достаточно серьезными трудностями, и их исследование потребовало большой предварительной методической работы и проведения значительного объема вычислений на ЭВМ.

Основные оригинальные результаты диссертационной работы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Проведено исследование критических свойств фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием. Рассчитаны статические магнитные и киральные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , намагниченности  $\beta$ ,  $\beta_k$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ , и индекс радиуса корреляции  $\nu$  и  $\nu_k$ .
2. Изучен и установлен характер критического поведения фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке в зависимости от величины межслойного обменного взаимодействия. Обнаружено, что класс универсальности критического поведения этой модели не меняется вплоть до значения межслойного обменного взаимодействия  $r=0.05$ . При дальнейшем уменьшении величины  $r$ , по-видимому, наблюдается переход от трехмерного поведения к квазидвумерному.
3. Получены температурные зависимости основных термодинамических функций  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с ферро- и антиферромагнитными типами межплоскостного взаимодействия. Рассчитаны статические

магнитные и киральные критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$ , параметров порядка  $\beta$ ,  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$ .

4. Показано, что  $3d$  фрустрированная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с ферро- и антиферромагнитными типами межплоскостного взаимодействия принадлежат к одному и тому же классу универсальности и образуют новый киральный класс универсальности критического поведения.
5. Проведены исследования  $3d$  фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Рассчитаны все основные эффективные магнитные и киральные критические индексы.
6. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.
7. Разработан комплекс программ для ЭВМ, с помощью которого можно исследовать статические критические свойства фрустрированных спиновых моделей.
8. Подтверждена эффективность применения репличного алгоритма метода Монте-Карло для исследования фрустрированных спиновых систем на слоистых треугольных решетках.

Таим образом, полученные при выполнении данной работы результаты, использованные алгоритмы, приемы и способы расчета критических параметров создают надежную основу для исследования методами вычислительной физики слоистых спиновых моделей с фрустрациями.

---

---

В заключении хотелось бы выразить глубокую благодарность моему научному руководителю член-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук, профессору **Муртазаеву Акаю Курбановичу** и научному консультанту кандидату физико-математических наук **Рамазанову Магомедшейху Курбановичу** за предложенную тему исследования, постоянное внимание и благожелательный интерес к работе, полезные обсуждения результатов и большую помощь, оказанную при выполнении настоящей работы.

Автор также глубоко признателен всем сотрудникам лаборатории вычислительной физики и физики фазовых переходов, принимавшим активное участие в обсуждении результатов работы.

## ЛИТЕРАТУРА.

1. Паташинский А.З., Покровский В.А. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 380 с.
2. Паташинский А.З., Покровский В.А. Метод ренормализационной группы в теории фазовых переходов // УФН. – 1977. – Т.121, вып.1. – С.55-96.
3. Ма Ш. Современная теория критических явлений // Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. – М.: Мир, 1980. – 298 с.
4. Вильсон К., Когут Д. Ренормализационная группа и  $\varepsilon$ -разложение / Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. В.К. Федянина. – М.: Мир, 1975. - 256 с.
5. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления // Пер. с англ. А.И. Мицека , Т.С. Шубиной; Под ред. С.В. Вонсовского. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
6. Гинзбург В.Л. О физике и астрофизике. – М.: Наука, 1985. – 400 с.
7. Фишер М. Физика критического состояния // Пер.с англ. М.Ш. Гитермана. – М.: Мир, 1968. – 221 с.
8. Loison D., Sokolov A. I., Delamotte B., Antonenko S. A., Schotte K. D., Diep H. T. Critical behavior of frustrated systems: Monte Carlo simulations versus renormalization group // Письма в ЖЭТФ. – 2000. – V.72, N.6. – С.487–492.
9. Mailhot A., Plumer M.L., Caille A. Finite-size scaling of the frustrated model on a hexagonal lattice // Phys. Rev. B. – 1994-II. – V.50, N.10. – P.6854-6858.

10. Kawamura H. Spin and Chirality Orderings of Frustrated Magnets — Stacked-Triangular Antiferromagnets and Spin Glasses // arXiv:cond-mat/0111060. v1. 5 Nov. 2001.
11. Kawamura H. Monte Carlo Study of Chiral Criticality –XY and Heisenberg Stacked- Triangular Antiferromagnets // J. Phys. Soc. Jap. – 1992. – V.61, N.4. – P.1299–1325.
12. Ising E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus // Z. Physik. – 1925. – Bd.31, 3. – S.253-258.
13. Onsager L. Crystal statistics. 1: A two- dimensional model with an order-disorder transitions // Phys. Rev. – 1944. – V.65, – P.117-149.
14. Berlin T.H., Кас М. The spherical model of a ferromagnet // Phys. Rev. – 1952. –V.86, N.6. – P.821-835.
15. Lieb E.H. Residual entropy of square ice // Phys. Rev. – 1967. – V.162, N.1. – P.162-172.
16. Lieb E.H. Exact solution of the F model of an antiferroelectric // Phys. Rev. Lett. – 1967. – V.18, N.24. – P.1046-1048.
17. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике // Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
18. Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. – 1999. – 169, №7. – С. 773–795.
19. Bhattacharya T., Billoire A., Delduc F. and Jolicoeur Th. Critical behavior of the antiferromagnetic Heisenberg model on a stacked triangular lattice // J. Physique 4, 181 (1994).
20. Binder K., Luijten E. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models // Phys. Reports. – 2001. – V. 344. – P.179-253.



21. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena // *Physica A.* – 1994. – V. 205. – P.41 – 64.
22. Peczak P., Ferrenberg A.M., Landau D.P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V.43, N. 7. – P.6087-6093.
23. Antonenko S.A., Sokolov A.I. Critical exponents for a three-dimensional  $O(n)$  – symmetric model with  $n > 3$  // *Phys. Rev. E.* – 1995. – V. 51, N. 3. – P. 1894-1898.
24. Swendsen R.H., Wang J. – Sh. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – V.58, N. 2. – P.86-88.
25. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems // *Phys. Lett.* – 1989. – V.62, N. 4. – P.361-364.
26. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – V. 61, N. 23. – P.2635-2638.
27. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. Optimized Monte Carlo data analysis // *Phys. Rev. Lett.* – 1989, - V.63, N. 12. – P.1195-1198.
28. Munger E.P., Novotny M.A. Reweighting in Monte Carlo and Monte Carlo renormalisation-group studies // *Phys. Rev. B.* - 1991. – V.43, N. 7. – P.5773-5783.
29. Ferdinand A.E., Fisher M.E. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice // *Phys. Rev.* – 1969. – V.185, N. 2 – P.832-846.
30. Fisher M.E., Barber M.N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region // *Phys. Rev. Lett.* – 1972. – V. 28, N. 23. – P.1516-1519.
31. Фаворский И.А. Свойства малых сферических частиц с дипольным взаимодействием // *ФТТ.* – 1980. Т.22, вып.7. – С.2222-2224.
32. Белоборов И.П., Гехт Р.С., Игнатченко В.А. Основное состояние в системах с дипольным взаимодействием // *ЖЭТФ.* – 1983. – Т.84, №3. – С.1097-1110.

33. Гехт Р. С. Магнитные состояния и фазовые переходы во фрустрированных антиферромагнетиках с треугольной решеткой // УФН. – 1989. – Т.159, № 2. – С. 261–296.
34. Доценко Вик.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком // УФН. – 1995. – 165, № 5. – С. 481–528.
35. Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике // Пер. с англ. В.Н. Новикова, К.К. Сабельфельда; Под. ред. Г.И. Марчука, Г.А. Михайлова. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
36. Holm C., Janke W. Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study // Phys. Rev. – 1993-I. - V.48, N. 2. – P.936-950.
37. Cullen John. J., Landau D. P. Monte Carlo studies of one-dimensional quantum Heisenberg and XY Models // Phys. Rev. – 1983. - V.27, N. 1. – P.297-313.
38. Nonomura Y. New Quantum Monte Carlo Approach to Ground-State Phase Transition in Quantum Spin Systems // Jour. Phys. Soc. Jap. – 1998. - V.67, N. 1. – P.5-7.
39. Крокстон К. Физика жидкого состояния // Пер. с англ. А.Г. Башкирова, И.В. Вдовиченко; Под ред. А.И. Осипова. –М.: Мир, 1978. – 400 с.
40. Вуд В.В. Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло // Физика простых жидкостей // Под ред. Х.М. Темперли, Д.С. Роулинсон, Т.С. Рашбрука. – М.: Мир, 1978.
41. Ермаков С. М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. –М. : Мир, 1982. – 292 с.
42. Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Generalized-Ensemble Algorithms for Molecular Simulations of Biopolymers // preprint cond-mat/0012021.

43. Metropolis N., Rosenbluth W., Rosenbluth N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines // *Jour. Chem. Phys.* – 1953. – V.21, N. 6. – P.1087-1092.
44. Wood W.W., Parker F.R. Monte-Carlo equation of state of molecules interactions with the Lenard-Jones potential. I: A supercritical isotherm at about twice the critical temperature // *Jour. Chem. Phys.* –1957. – V.27, N.3. – P. 720-733.
45. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю. Н. Статистическая механика магнитоупорядочных систем. – М.: Наука, 1987. – 264 с.
46. Fosdik L.D. Studies of Monte Carlo method applied to the Ising lattice problem // *Bull. Amer. Phys. Soc.* – 1957. – V. 2, N. 4. – P. 239.
47. Landau D.P. Finite-size behavior of the Ising square lattice // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V.13, N.7. – P. 2997 – 3011.
48. Landau D.P. Finite-size behavior of the simple-cubic Ising lattice // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V.14, N.1. – P. 255 – 262.
49. Landau D.P. Critical behavior of bcc Ising antiferromagnet in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* – 1977. – V.16, N.9. – P. 4164 – 4170.
50. Binder K. Thermodynamics of finite spin systems // *Phys. Stat. Sol. B.* – 1971. – V.46, N. 2. – P. 567 – 577.
51. Landau D.P. Critical behavior of bcc Ising antiferromagnet in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* – 1977. – V.16, N.9. – P. 4164 – 4170.
52. Hua L., Tucker J.W. Monte Carlo study of the anisotropic cubic spin-one Ising ferromagnet. // *Jour. Magn. and Magn. Mater.* – 1995. – V.140-144, N. 3. – P.1509 –1510.
53. Aoyama Y., Chen W., Tanaka M. Monte Carlo studies on phase transitions of the two-dimensional  $S = 1$  Ising model with biquadratic interaction // *Jour. Phys. Soc. Jap.* – 1997. – V. 66, N. 1. – P. 272 – 273.
54. Newman M.E.J., Barkema G.T. Monte Carlo study of the random-field Ising model // *Phys. Rev. E.* – 1996. – V. 53, N. 1. – P. 393 – 404.

55. Gavliniski E.T., Kumar S., Grant M., Gunton J.D., Kaski K. Breakdown of self-similar scaling in the two-dimensional random-field Ising model: A Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 32. – P. 1575 – 1580.
56. Dekker C., Dikken B.J., Arts A.F.M. Monte Carlo investigation of diluted antiferromagnets in high magnetic fields // *Sol. Stat. Com.* – 1985. – V.54, N. 10. – P. 887 – 889.
57. Nagai O., Yamada Y., Nishino K., Miyatake Y. Monte Carlo studies of Ising ferromagnets and the Villain model in transverse fields // *Phys. Rev. B.* – 1987. – V. 35, N. 7. – P. 3425 – 3430.
58. Bidaux R., Boccara N. Order of phase transition in a three-dimensional Ising model with three-spin interactions // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 34, N. 7. – P. 4881 – 4884.
59. Danino M. Ising lattices with four-spin interactions // *Sol. Stat. Comm.* – 1984. – V.52, N. 10. – P. 885 – 888.
60. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей // *ЖЭТФ* – 2001. – 120, №6. – С.1535-1543.
61. Coppersmith S.N. Low-temperature phase of a stacked triangular Ising antiferromagnet // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 32, N.3. – P. 1594 – 1594.
62. Kimel J.D., Black S., Carter P., Wang Y.L. Monte Carlo study of the antiferromagnetic two-dimensional Blume-Capel model // *Phys. Rev. B.* – 1987. – V. 35, N. 7. – P. 3347 – 3353.
63. Kerler W., Rehberg P. Cluster mechanisms in the fully frustrated Ising model // *Phys. Rev. B.* – 1994. – V. 49, N. 14. – P. 9688 – 9696.
64. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Рамазанов М.К. Критические свойства трехмерной фрустрированной модели Изинга на кубической решетке // *ФТТ.* – 2005. Т.47, №6. – С.1125-1129.

65. Binder K., Landau D.P. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions // *Phys. Rev. B.* – 1980. – V. 21, N. 5. – P. 1941 – 1962.
66. Oitmaa J., Fernandez J.F. Phase transition in type-I fcc Ising antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39, N. 16B. – P. 11920 – 11927.
67. Hernandez L., Ceva H. “2+4” model: A Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 43, N. 1. – P. 698 – 704.
68. Buendia G.M., Cardona R. Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising ferrimagnetic model // *Phys. Rev. B.* – 1999. – V. 59, N.10. – P. 6784 – 6789.
69. Муртазаев А.К. Исследование кооперативных явлений в решеточных моделях магнетиков и сегнетоэлектриков методами численного эксперимента: Диссертация канд. физ.-мат. наук ЛГУ им. А.А. Жданова. – Л., 1987. – 180с.
70. Binder K., Rouch H., Wildpaner V. Monte Carlo calculation of the magnetization superparamagnetic particles // *Phys. Chem. Sol.* – 1970. – V.31. – P. 391 – 397.
71. Фаворский И.А., Воронцов-Вельяминов П.Н., Камара Сейдуба, Рощиненко О.М., Громова Н.Б. Моделирование магнитных кластеров методом Монте-Карло. – Киев: Препринт ИТФ АН УССР, ИТФ-85-93Р, 1985. – С. 23.
72. Nijmeijer M.J.P., Weis J.J. Monte Carlo simulation of the ferromagnetic order-disorder transition in a Heisenberg fluid // *Phys. Rev. E.* – 1996. – V.53, N. 1. – P. 591 – 600.
73. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A., Khizriev K.Sh. Critical properties of model of a real magnetic Gd. // *Phys. Met. Met.* – 2001. – V.92, – P. S110 – S114.

74. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A. Monte-Carlo investigation of critical phenomena in models of real magnetics with crossovers. // *Comp. Phys. Commun.* – 2002. – V.147. – P.447-450.
75. Муртазаев А.К. Моделирование малых магнитных частиц  $V_2O_3$ . // *Математическое моделирование.* – 1992. - Т.4, № 9. - С.114-120.
76. Муртазаев А. К., Фаворский И. А. Моделирование малых магнитных частиц  $Cr_2O_3$  и  $Fe_2O_3$  // *ФНТ.* – 1993.- Т. 19, № 2. - С.160-164.
77. Муртазаев А. К., Алиев Х.К., Камилов И. К., Хизриев К.Ш. Критическое поведение малых магнитных частиц  $Cr_2O_3$  // *ФНТ.* – 1998. - Т.24, № 5. - С.462-467.
78. Villain J. Spin glass with non-random interactions // *J. Phys. C. Solid State Phys.*– 1977. – V.10, N.10.- P.1717-1734.
79. Chui S. T., Forgacs G., Hatch D. M. Ground state and the nature of a phase transition in a simple cubic fully frustrated Ising model // *Phys. Rev. B* – 1982. V.25, N.11. – P.6952-6958.
80. Diep H. T., Lallemand P., Nagai O. Critical properties of a simple cubic fully frustrated Ising lattice by Monte Carlo method // *J. Phys. C. Solid State Phys.*– 1985. – V.18, N.5.- P.1067-1078.
81. Bernardi L. W., Hukushima K., Takayama H. Fully frustrated Ising system on a 3D simple cubic lattice: revisited // *J. Phys. A. Mathematical and General.* – 1999. – V.32, N.10.- P.1787-1800.
82. Loison D., Schotte K. D. First and second order transition in frustrated XY systems // preprint cond-mat/0001134.
83. Berker A. N., Grestand G. S., Soukoulis C. M., Blanckshtein D., Ma M. Orderings and renormalization-group flows of a stacked frustrated triangular system in three dimensions // *J. Appl. Phys.* – 1984. – V.55, N.6. – P.2416-2418.
84. Olsson P. Monte Carlo study of the Villain version of the fully frustrated XY model // *Phys. Rev. B.* – 1997-II. – V.55, N.6. – P.3585-3601.

85. Loison D. Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians  $H=J\sum(S_i S_j)^3$  // Phys. Lett. A – 1999. – V.257. – P.83-87.
86. Sweeny M. Monte Carlo study of weighted percolation clusters relevant to the Potts models // Phys. Rev. – 1983-I. - V.27.– P.4445.
87. Goodman J., Sokal A. D. Multigrid Monte Carlo method for lattice field theories // Phys. Rev. Lett. – 1986. – V.56, N. 10. – P.1015-1018.
88. Creutz M. Overrelaxation and Monte-Carlo simulation // Phys. Rev. D. – 1987. - V. 36, N.2. – P. 515-519.
89. Schmidt K. E. Using renormalization-group ideas in Monte Carlo sampling // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V.51, N. 24. - P.2175-2178.
90. Swendsen R.H., Wang J.-S. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses // Phys. Rev. Lett. - 1986. – V.57, N. 21. – P. 2607-2609.
91. Hukushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations // Jour. Phys. Soc. Jap. - 1996. – V.65, N. 6. – P.1604-1608.
92. Wang J-S., Swendsen R. H. Low-temperature properties of the  $\pm J$  Ising spin glass in two dimensions // Phys. Rev. B. – 1988. – V.38, N.7. –P.4840-4844.
93. Wang J-S., Swendsen R. H. Monte Carlo and high-temperature-expansion calculations of a spin-glass effective hamiltonian // Phys. Rev. B. – 1988. – V.38, N.13. – P. 9086-9092.
94. Kandel D., Ben-Av R., Domany E. Cluster dynamics for fully frustrated systems // Phys. Rev. Lett. – 1990. – V.65, N.8. – P.941-944.
95. Coddington P. D., Han L. On generalized cluster algorithms for frustrated spin models // preprint cond-mat/9402030.
96. Berg B. A., Neuhaus T. Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions // Phys. Rev. Lett. – 1992. V.68, N.1. - P.9–12.

97. Hansmann U. H. E., Okamoto Y. Monte Carlo simulations in generalized ensemble: Multicanonical algorithm versus simulated tempering // *Phys. Rev. E.* – 1996. V.54, N.11. – P.5863-5865.
98. Hesselbo B., Stinchcombe R. B. Monte Carlo Simulation and Global Optimization without Parameters // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. V.74, N.3. – P.2151–2155.
99. Barber M. N. Finite-size scaling. In: *Phase transitions and critical phenomena*, V.8, p.1 (Academic press, New York, 1983).
100. Privman V., Fisher M. E. Universal critical amplitudes in finite-size scaling // *Phys. Rev. B.* – 1984. – V.30, N. 1. – P.322-327.
101. Privman N. (Editor): *Finite-size scaling and numerical simulation* (World scientific, Singapore, 1990).
102. Фишер М. Теория сингулярностей в критической точке // *Устойчивость и фазовые переходы / Пер. с англ. С.П. Малышенко, Е.Г. Скороцкой.* – М.: Мир, 1973. – С.373.
103. Кузьмин Е.В., Петраковский Е.А., Завадский Э.А. *Физика магнитоупорядоченных веществ.* Новосибирск: Наука, 1976. 287 с.
104. Петраковский Е.А. Аморфные магнетики // *Успехи физ. наук.* 1981. Т. 134. С. 305 – 331.
105. Binder K., Young A.P. Spin glass: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions // *Rev. Mod. Phys.* – 1986. –V.58, N.4. – P.801-976.
106. Rowe J. M., Rush J.J., Hinks D. G., Susman S. Neutron Scattering Study of the Dynamics of  $(\text{KCN})_{0.5}(\text{KBr})_{0.5}$  // *Phys. Rev. Lett.* – 1979. – V.43, N.16. – P.1158-1161.
107. Reich D.H., Rosenbaum T.F., Aeppli G., Guggenheim H.J. Ferromagnetism, glassiness, and metastability in a dilute dipolar-coupled magnet // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V.34, N.7. – P.4956-4958.
108. Edwards S. F., Anderson P.W. Theory of spin glasses // *J. Phys. F.: Met. Phys.* – 1975. – V.5, N.5. – P.965-974.



109. Cannella V., Mydosh J. A. Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V.6, N.11. – P.4220-4237.
110. Ефимова Н. Н. Фрустрированные состояния типа спинового стекла в разбавленных ферримагнитных оксидах // *ФНТ.* – 2005. – Т.31, № 5. – С. 513–529.
111. Toulouse G. Theory of the frustration effect in spin glasses. // *Commun. Phys.* – 1977. – V.2, N.4. – P.115-119.
112. Доценко В. С. Физика спин-стекольного состояния // *УФН.* – 1993. – 163, № 6. – С. 1–37.
113. Parisi G. A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin glasses // *J. Phys. A: Mathematical and General.* – 1980. – V.13, N.4. – P.L115-L121.
114. Parisi G. Order Parameter for Spin-Glasses // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. V.50, N.24. – P.1946-1948.
115. Kawamura H. Universality of phase transitions of frustrated antiferromagnets // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1998. – V.10, N.22. – P.4707-4754.
116. Малеев С. В. Рассеяние поляризованных нейтронов в магнетиках // *УФН.* – 2002. – Т.172, № 6. – С. 630–646.
117. Plumer M. L., Mailhot A. Tricritical behavior of the frustrated XY antiferromagnet // *Phys. Rev. B.* – 1994. – V.50, N.21. – P.16113-16116.
118. Wang J., Belanger D. P., Gaulin B. D. Specific-heat critical behavior of CsMnBr<sub>3</sub> and holmium: Two tests of chiral universality // *Phys. Rev. Lett.* – 1991. – V.66, N.24. – P.3195-3198.
119. Deutchmann R., Lohneysen H. von, Wosnitza J., Kremer R. K., Visser D. Critical behaviour in the specific heat of an antiferromagnet with chiral symmetry // *Europhys. Lett.* – 1992. – V.17, N.7. – P.637-642.

120. Mason T. E., Gaulin B. D., Collins M. F. Neutron scattering measurements of critical exponents in  $\text{CsMnBr}_3$ : A  $Z_2$  antiferromagnet // Phys. Rev. B. – 1989. – V.39, N.1. – P.586-590.
121. Kadowaki H., Shapiro S. M., Inami T., Ajiro Y. New universality class of antiferromagnetic phase transition in cesium tribromomanganate // J. Phys. Soc. Jpn. – 1988. – V.57, N.8. – P.2640-2643.
122. Ajiro Y., Nakashima T., Unno Y., Kadowaki H., Mekata M., Achiwa N. New critical exponent  $\beta$  of the XY antiferromagnet on stacked triangular lattice, cesium tribromomanganate // J. Phys. Soc. Jpn. – 1988. – V.57, N.8. – P.2648-2650.
123. Plakhty V. P., Kulda J., Visser D., Moskvina E. V., Wosnitza J. Chiral Critical Exponents of the Triangular-Lattice Antiferromagnet  $\text{CsMnBr}_3$  as Determined by Polarized Neutron Scattering // J. Phys. Rev. Lett. – 2000. – V.85, N. 18. – P.3942-3945.
124. Svistov L.E., Smirnov A.I., Prozorova L.A., Petrenko O.A., Micheler A., Buttgen N., Shapiro A.Ya., Demianets L.N. Magnetic phase diagram, critical behaviour and 2D-3D crossover in a triangular lattice antiferromagnet  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$  // preprint cond-mat/0603617 v1.
125. Биндер К., Хеерман Д. В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / Пер. с англ. В.Н. Задкова. – М.: Наука, 1995. – 144 с.
126. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Статическое критическое поведение трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с переменным межслойным обменным взаимодействием. // ЖЭТФ. – 2007. Т.132, №5, – С.1152-1159.
127. Сосин С.С., Прозорова Л.А., Смирнов А.И. Новые магнитные состояния в кристаллах // УФН 175, 92 (2005).
128. Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в спиновых решеточных системах методами Монте-Карло // УФН 176, 1119 (2006).

129. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Рамазанов М.К. Статическое критическое поведение 3D фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке // ФНТ 32, 323 (2006).
130. Pelissetto A., Rossi P., and Vicari E. Critical behavior of frustrated spin models with noncollinear order // Phys. Rev. B 63, 140414(R) (2001).
131. Свистов Л.Е., Смирнов А.И., Прозорова Л.А. и др. О возможном сосуществовании спиральной и коллинеарной структур в антиферромагнитном  $\text{KFe}(\text{MoO}_4)_2$  // Письма в ЖЭТФ 80, 231 (2004).
132. Свистов Л.Е., Прозорова Л.А., Бюттген Н. и др. Исследование магнитной структуры квазидвумерного антиферромагнетика  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$  на треугольной решетке методом ЯМР( $^{87}\text{Rb}$ ) // Письма в ЖЭТФ 81, 133 (2005).
133. Svistov L.E., Smirnov A.I., Prozorova L.A. et al. Quasi two-dimensional antiferromagnet on a triangular lattice  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$  // Phys. Rev. B. 67, 094434 (2003)
134. Pelissetto A., Rossi P., and Vicari E. Chiral exponents in frustrated spin models with noncollinear order. // Phys. Rev. B 65, 020403(R) (2001).
135. Pelissetto A. and Southern B.W. Spin stiffness of stacked triangular antiferromagnets // Phys. Rev. B 67, 184407 (2003).
136. Itakura M. Monte Carlo Renormalization Group Study of the Heisenberg and the XY Antiferromagnet on the Stacked Triangular Lattice and the Chiral  $\phi^4$  Mode // J. Phys. Soc. Jpn. – 2003. – V.72, N.1.
137. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. Исследование критических свойств трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами монте – Карло // ФНТ 35, 663 (2009).
138. Le Guillou J.C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // Phys. Rev. B 21, 3976 (1980).
139. Zumbach G, Nucl. Phys. Phase transitions with  $O(n)$  symmetry broken down to  $O(n-p)$  // Phys. Rev. B 413, 771 (1994).

140. Ballesteros H.G, Fernandez L.A., Martin-Mayor V. et al. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. B. 58, 2740 (1998).
141. Aharony A., Harris A.B., Wiseman S. Critical Disordered Systems with Constraints and the Inequality  $\nu > 2/d$  // Phys. Rev. Lett. 81, 252 (1998).
142. Loison D., Diep H.T. Antiferromagnetic stacked triangular lattices with Heisenberg spins: Phase transition and effect of next-nearest-neighbor interaction // Phys. Rev. B. 50, №22, 16453 (1994).
143. Loison D. //Phase transitions in frustrated vector spin systems: numerical studies // arXiv:cond-mat/0504326, v1, (2005).
144. Wang F. and Landau D.P, Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
145. Wang F. and Landau D.P., Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram // Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).